

Kilkoro naukowców z dwóch ośrodków akademickich postanowiło połączyć siły w poszukiwaniu nowych środków w walce z patologicznymi mikroorganizmami. Wspólny projekt opiera się na wykorzystaniu zarówno metod chemii obliczeniowej jak i eksperymentalnej. Serie nowych związków fenyloboronowych zostaną otrzymane i zbadane pod kątem ich aktywności biologicznej zarówno w testach na mikroorganizmach (*in vitro*) jak i za pomocą metod obliczeniowych (*in silico*). Celem proponowanego projektu jest nie tylko odpowiedź na pytanie czy badane związki wykazują aktywność biologiczną, ale również określenie dokładnego mechanizmu ich działania. Zostaną zastosowane dwa komplementarne podejścia do tego problemu. W pierwszym z nich, zbadana zostanie aktywność biologiczna odpowiednio dobranych związków modelowych. W drugim, za pomocą metod obliczeniowych przeprowadzone zostaną badania oddziaływań pomiędzy związkami modelowymi a centrami aktywnymi odpowiednich enzymów. Takie wszechstronne podejście do problemu powinno zaowocować zrozumieniem mechanizmów decydujących o aktywności biologicznej badanych związków. Pozwala również na racjonalne zaprojektowanie oraz otrzymanie nowych, efektywnych substancji czynnych.