

Poszukiwanie nowych leków i środków ochrony roślin polega, między innymi, na projektowaniu związków chemicznych, które hamują aktywność enzymów niezbędnych dla rozwoju patogena (komórek nowotworowych, grzybów). Projektowania tego dokonuje się w oparciu o znajomość budowy trójwymiarowej (przestrzennej) wybranych enzymów ważnych dla rozwoju choroby. Struktura taka dostępna jest z badań krystalograficznych lub NMR-owskich. Sęk w tym, że enzym w roztworze przyjmuje różne formy (konformacje), a konkretny inhibitor wiąże się tylko z jedną z nich. Co gorsza, wiązaniu inhibitora najczęściej towarzyszy zmiana struktury przestrzennej enzymu. Zmiany te można badać w roztworze za pomocą techniki NMR pod warunkiem, że inhibitor zawiera w strukturze, widoczne za jej pomocą, heteroatomy - czyli atomy inne niż wodór i węgiel.

Ten projekt dotyczy konstrukcji inhibitorów zawierających atomy fosforu i fluoru, które pozwalają udanie śledzić takie zmiany. Zatem, bazując na dotychczasowym doświadczeniu autorów projektu skonstruowane zostaną takie inhibitory aminopeptydaz i zbadane zostanie ich użyteczność. Wyniki badań powinny pozwolić nie tylko na lepsze zrozumienie architektury wybranych do badania enzymów - aminopeptydaz. Stanowią one cel projektowania leków przeciwnowotworowych, a więc badania te mogą zaowocować nowymi kandydatami na substancje terapeutyczne.