

Kvantově mechanické výpočty vlastností farmakologicky významných molekul

Vedoucí projektu: RNDr. Václav Profant, Ph.D.
profant@karlov.mff.cuni.cz

Fyzikální ústav UK
 Oddělení fyziky biomolekul

Konzultant: Mgr. Štěpán Jílek
jilek@karlov.mff.cuni.cz

Pro výzkum a charakterizaci chemických sloučenin s farmakologickými účinky je využívána celá řada fyzikálních metod. Jednou z nich je vibrační spektroskopie, nedestruktivní metoda založená na interakci elektromagnetického záření se vzorkem, která umožňuje velice přesnou identifikaci studované látky (kvalitativní analýza) i stanovení množství této látky ve vzorku (kvantitativní analýza). Nezbytnou součástí kvalitativní analýzy jsou i kvantově mechanické simulace, které umožňují detailní charakterizaci studovaných látek a interpretaci experimentálních spekter.

Náplní projektu bude teoretická výpočetní studie vybrané farmakologicky významné molekuly pomocí *ab-initio* **kvantově mechanických simulací** a metody **teorie funkcionálu hustoty**. Bude provedena konformační analýza, simulace spekter nejvíce zastoupených konformerů a charakterizace význačných spektrálních pásů. Výsledky simulací budou porovnány s experimentálními daty.

Student se seznámí s principy kvantové teorie molekul a osvojí si **základy práce na výpočetním klastru**.

