

ZADÁNÍ STUDENTSKÉ PRÁCE

Název práce:

Kvantově-mechanické výpočty organokovových komplexů významných při léčbě nádorových onemocnění ve spojitosti se strojovým učením.

Vedoucí projektu: prof. Jaroslav Burda
Email: burda@karlov.mff.cuni.cz

Zásady pro vypracování:

Práce se bude skládat z několika kroků. Nejprve bude třeba provést rešerši zkoumaných Pt(IV) struktur ve vztahu k jejich protirakovinné aktivitě. Jen za minulý rok bylo publikováno více než 100 Pt(IV) komplexů u kterých byl stanoven parametr IC₅₀ pro různé typy rakovinných bujení. Na základě této rešerše bude postavena databáze, kde další potřebné parametry budou získány na základě kvantově-mechanických výpočtů pro výše nalezené komplexy. Na základě znalosti elektronové hustoty budou určeny vazebné energie jednotlivých ligandů, stanoveny mapy elektrostatických potenciálů a termodynamické deskriptory. V případě hlubšího zájmu a osobního nasazení by bylo možné pokračovat v hledání korelačních vztahů různými metodami strojového učení (machine learningu).

Zvolené komplexy budou nejprve podrobeny geometrické optimalizaci a pro finální struktury budou provedeny analýzy vlnových funkcí resp. elektronové hustoty pomocí různých výpočetních kvantově-mechanických programů.

Seznam odborné literatury:

1. J. Fišer: Úvod do kvantové chemie, Academia Praha, 1983
2. N. Ostlund, A. Szabo: Modern Quantum Chemistry, McGraw-Hill Inc. New York, 1989