

Katedra: KCHFO

Akademický rok: 2024/2025

ZADÁNÍ STUDENTSKÉ PRÁCE

Název práce:

Reaktivita a fyzikálně-chemické vlastnosti komplexů přechodných kovů při blokování redoxního centra Thioredoxin Reduktázy - nová protirakovinná léčiva.

Vedoucí projektu: prof. Jaroslav Burda

Email: burda@karlov.mff.cuni.cz

Zásady pro vypracování:

Thioredoxinový systém hraje zásadní úlohu v řízení celkové intracelulární redoxní rovnováhy buněk. Je z podstatě složen z hexamérní struktury složené z menších redoxních proteinů - Thioredoxin Reduktázy (TrxR). Z experimentálních prací je známo, že zlatné komplexy působí jako selektivní blokátory těchto center.

Práce bude založena na kvantově-chemických výpočtech komplexů přechodných kovů, u kterých byly nalezeny protirakovinné účinky. Pro tyto komplexy budou vypočteny termodynamická data a odhadnuty kinetické parametry hydratačních procesů, které hrají klíčovou úlohu při aktivaci léčiv. 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

Dimerní funkční jednotka TrxR:

