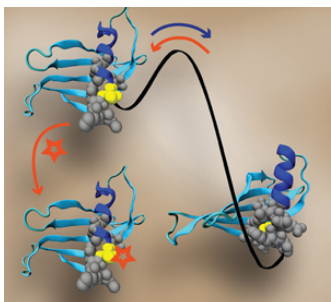
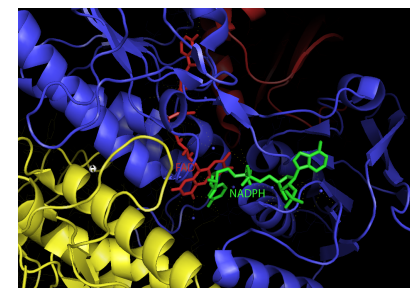


Kvantově-mechanický a QM/MM popis reakčních center: Termodynamický a kinetický pohled na inhibici protirakovinných mechanismů.

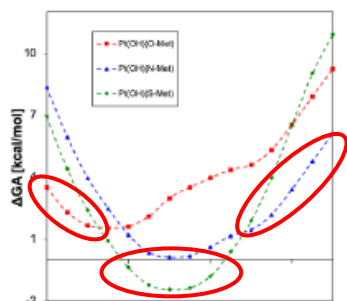
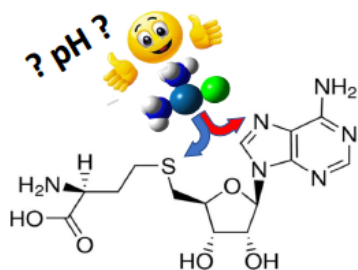
Jaroslav Burda, KCHFO



- ❖ Výpočty energetických profilů interakcí kovů s biologicky aktivními místy v buněčném prostředí: QM a QM/MM popis termodynamiky a kinetických faktorů a jejich ovlivnění pH prostředím.



- ❖ Interakce Au(I) komplexů s thioredoxin reduktázou => zvýšení oxidačního stresu v rakoviných buňkách => apoptóza



Pt:O Pt:S Pt:N preference

- ❖ pH závislé modely pro výpočet Gibbs-Albertyho volné energie: kde se při jakém pH koordinují zvolené komplexy?