

Ustalanie struktur przestrzennych związków biologicznie czynnych

Krzysztof Brzozowski

Gimnazjum nr 12 Gdynia

Peptydy jako związki biologicznie czynne stanowią ciekawe obiekty do badań strukturalnych. Znając strukturę takiej cząsteczki możliwe jest wytłumaczenie mechanizmów powstawania różnych chorób na poziomie molekularnym. Możliwe jest również projektowanie nowych leków.

Jedną z szeroko stosowanych metod ustalania struktur przestrzennych związków jest połączenie dwuwymiarowej spektroskopii NMR z komputerowymi technikami obliczeniowymi. W metodzie tej istnieje kilka podejść. W każdym jednak, pierwszym etapem jest zarejestrowanie serii widm i ich zinterpretowanie. Kolejnym krokiem jest przeprowadzenie szeregu obliczeń, do których danymi wejściowymi są informacje uzyskane z eksperymentu NMR. Metody obliczeniowe, które mogą zostać wykorzystane to: dynamika molekularna z nałożonymi ograniczeniami tzw. więzami, protokół geometrii odległości (ang. *Distance Geometry*), generowanie zbioru konformacji i późniejsze obliczenie wag statystycznych.

W swojej prezentacji pokażę szczegółowy opis, w jaki sposób zostały ustalone struktury neuropeptydu γ [1], i niskocząsteczkowego inhibitora receptora tachykininowego NK-2 [2].

LITERATURA

1. The Study of Conformational Equilibrium of c[Gln-Trp-Phe-Gly-Leu-Met], a NK-2 Tachykinin Antagonist, K. Brzozowski, A. Łęgowska, S. Rodziejewicz-Motowidło, A. Liwo, K. Rolka, Polish J. Chem., 76, 807-814, 2002.
2. Conformational Solution Studies of Neuropeptide γ Using CD and NMR Spectroscopy, S. Rodziejewicz-Motowidło, K. Brzozowski, A. Łęgowska, A. Liwo, J. Silberring, M. Smoluch, K. Rolka, J. Peptide Sci. 8, 211-226 2002.