**Je možné za pár minut spočítat, jak proteiny interagují s léčivy? Vědci z ÚOCHB předkládají univerzální a přesnou výpočetní metodu.**

**20. 2. 2024**

**Vědecký tým z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR vyvinul unikátní výpočetní metodu, která dokáže během pouhých několika desítek minut přesně popsat interakci proteinu s molekulou potenciálního léčiva. Nová kvantově-mechanická skórovací funkce z ÚOCHB tak může významně urychlit hledání nových léků. Článek zveřejnil časopis Nature Communications.**

Studie ukazuje, že se poprvé jedná o výpočetní metodu tohoto typu, která je univerzálně použitelná. Výpočtáři z ÚOCHB otestovali deset různých proteinů s velkým množstvím navázaných malých molekul (ligandů) a s různě složitou strukturou. Výsledky porovnali nejen s dalšími výpočetními metodami, ale také s laboratorním experimentem a z obojího srovnání vycházejí velmi dobře.

*„Samozřejmě nejsme jediní, kdo to dělá, takových metod je víc. Většinou ale platí za rychlost nízkou přesností. Přesnější výpočty naopak trvají třeba i několik dní. Naše metody jsou jedinečné v tom, že dokážou zpracovat velké molekulární systémy v řádu desítek minut, a přitom si zachovávají výhody mnohem náročnějších kvantově-mechanických výpočtů.“* vysvětluje doc. Jan Řezáč, korespondenční autor článku ze skupiny Nekovalentní interakce prof. Pavla Hobzy.

Odborníci z této skupiny se mezimolekulovými interakcemi zabývají dlouhodobě. Soustředí se přitom hlavně na biomolekuly a výsledky jejich práce tak mají přímý vliv na počítačový návrh léků. Když totiž vědci hledají nový lék, cílí na určitý protein a hledají molekulu, která se na něj co nejsilněji váže. Hledají přitom ale jehlu v kupce sena, kdy musí otestovat velké množství molekul, aby mezi nimi našli takové, které mají zajímavý potenciál. To objevování nových léků výrazně zpomaluje a prodražuje. Pokud se podaří sílu vazby předpovědět a vytipovat tak molekuly, které nejlépe vyhovují zadání, pak výpočetní chemici ušetří experimentátorům práci, což vývoj léčiv významně urychluje. Potenciál výzkumu je tak silný, že se ho rozhodli podpořit i zástupci komerční sféry. S experty z ÚOCHB spolupracuje už nějaký čas jedna z velkých světových farmaceutických firem.

**Původní článek:** Pecina, A., Fanfrlík, J., Lepšík, M., Řezáč J. SQM2.20: Semiempirical quantum-mechanical scoring function yields DFT-quality protein–ligand binding affinity predictions in minutes. *Nat Commun* 15, 1127 (2024). https://doi.org/10.1038/s41467-024-45431-8

**Ústav organické chemie a biochemie AV ČR / ÚOCHB** ([**www.uochb.cz**](http://www.uochb.cz)) je přední mezinárodně uznávaná vědecká instituce, jejímž hlavním posláním je základní výzkum v oblasti chemické biologie a medicinální chemie, organické a materiálové chemie, chemie přírodních látek, biochemie a molekulární biologie, fyzikální chemie, teoretické chemie a analytické chemie. Nedílnou součástí poslání ÚOCHB je přenos výsledků základního výzkumu do praxe. Důraz na mezioborové zaměření výzkumu ústí do řady aplikací v medicíně, farmacii a dalších odvětvích.

--- KONEC TISKOVÉ ZPRÁVY ---

**KONTAKT PRO NOVINÁŘE:**

Veronika Sedláčková (ÚOCHB – Komunikace): [**veronika.sedlackova@uochb.cas.cz**](mailto:veronika.sedlackova@uochb.cas.cz)

mob: +420 602 160 135