

a vazebného cíle se naruší uspořádané vrstvy molekul vody a tím se energie naopak získává. Pokud by desolvatační energie pro léčivo a jeho vazebné místo byla vyšší než energie získaná vznikem komplexu léčivo-molekulární cíl, může být léčivo neúčinné. Všechny tyto faktory musí být při designu léčiv zohledňovány (5).

Závěr

Interakce strukturně specifických léčiv s jejich biologickými cíli jsou nezbytné pro vyvolání biologického účinku. Většina léčiv se navazuje na cílové biologické struktury pomocí několika nekovalentních interakcí, nejčastěji se jedná o vodíkovou vazbu, van der Waalsovy a hydrofobní interakce, příp.

iontovou vazbu. Existují ale i léčiva, která se vážou reverzibilní anebo ireverzibilní kovalentní vazbou. S rozvojem strukturní biologie a různých detekčních metod dochází k získávání nových poznatků a detailů o těchto interakcích a jsou zpřístupňovány nejen odborné lékařské a farmaceutické komunitě, ale i širší veřejnosti.

LITERATURA

- Hartl J, Palát K. Farmaceutická chemie I. Praha: Karolinum. 2016;104.
- Abraham DJ, Myers M, Stewart KD. Burger's Medicinal Chemistry, Drug Discovery and Development. 8th ed. Abraham DJ, Myers M, editors: John Wiley & Sons. 2021;6032.
- Davis A, Ward WE. The Handbook of Medicinal Chemistry Principles and Practise. Cambridge: Royal Society of Chemistry. 2015;753.
- Lemke TL, Williams DA. Foye's Principles of Medicinal Chemistry. 7. ed. Philadelphia: Lippincott Williams and Wilkins. 2013;1500.
- Patrick GL. An Introduction to Medicinal Chemistry. 6th ed. Oxford: Oxford University Press. 2017;752.
- Clark T, Hennemann M, Murray JS, et al. Halogen bonding: the σ -hole. J Mol Model. 2007;13(2):291-296.
- Atkins P, De Paula J. Fyzikální chemie. 1. ed. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická v Praze. 2013;944.
- Dimitrijevic BP, Borozan SZ, Stojanovic SD. π - π and cation- π interactions in protein-porphyrin complex crystal structures. RSC Adv. 2012;2(33):12963-12972.
- Řezáč J, Berka K, Horinek D, et al. The Stabilization Energy of the Glu-Lys Salt Bridge in the Protein/Water Environment: Correlated Quantum Chemical ab initio, DFT and Empirical Potential Studies. Collect Czech Chem Commun. 2008; 73(6-7):921-936.
- Singh J, Petter RC, Baillie TA, et al. The resurgence of covalent drugs. Nat Rev Drug Discov. 2011;10(4):307-317.
- Vasudevan A, Argiriadi MA, Baranczak A, et al. Chapter One – Covalent binders in drug discovery. In: Witty DR, Cox B, editors. Progress in Medicinal Chemistry. 58: Elsevier. 2019;1-62.
- Bissantz C, Kuhn B, Stahl M. A Medicinal Chemist's Guide to Molecular Interactions. Journal of Medicinal Chemistry. 2010;53(14):5061-5084.
- Civis S, Lamanec M, Spirko V, et al. Hydrogen Bonding with Hydridic Hydrogen-Experimental Low-Temperature IR and Computational Study: Is a Revised Definition of Hydrogen Bonding Appropriate? Journal of the American Chemical Society. 2023;145(15):8550-8559.
- Muller P. Glossary of Terms Used in Physical Organic-Chemistry. Pure Appl Chem. 1994;66(5):1077-1184.
- French RH. Origins and applications of London dispersion forces and Hamaker constants in ceramics. J Am Ceram Soc. 2000;83(9):2117-2146.
- Della Volpe C, Siboni S. From van der Waals equation to acid-base theory of surfaces: A chemical-mathematical journey. Rev Adhes Adhes. 2022;10(1):47-97.
- Headen TF, Howard CA, Skipper NT, Wilkinson MA, Bowron DT, Soper AK. Structure of pi-pi Interactions in Aromatic Liquids. Journal of the American Chemical Society. 2010;132(16):5735-5742.
- Clark T, Hennemann M, Murray JS, Politzer P. Halogen bonding: the sigma-hole. J Mol Model. 2007;13(2):291-296.
- Parisini E, Metrangola P, Pilati T, Resnati G, Terraneo G. Halogen bonding in halocarbon-protein complexes: a structural survey. Chem Soc Rev. 2011;40(5):2267-2278.
- Hobza P. Noncovalent bonds with σ -hole: Halogen, chalcogen and pnictogen bonds. Chemické Listy. 2016;110(5):371-375.
- Burley SK, Bhikadiya C, Bi CX, Bittrich S, Chao HY, Chen L, et al. RCSB Protein Data Bank (RCSB.org): delivery of experimentally-determined PDB structures alongside one million computed structure models of proteins from artificial intelligence/machine learning. Nucleic Acids Res. 2023;51(D1):D488-D508.
- Holcomb M, Chang YT, Goodsell DS, Forli S. Evaluation of AlphaFold2 structures as docking targets. Protein Science. 2023;32(1):8.