



# POČÍTAČOVÝ DESIGN NANOMATERIÁLŮ



Centrum  
přírodovědných  
a technických oborů

Univerzita J. E. Purkyně v Ústí n. L.  
Přírodovědecká fakulta UJEP  
Pasteurova 3632/15  
400 96 Ústí nad Labem

**doc. RNDr. Marek Malý, Ph.D.**

E-mail: [marek.maly@ujep.cz](mailto:marek.maly@ujep.cz)

Tel.: +420 475 286 651, +420 603 395 987

Kancelář: 2.25

## PŘEDSTAVENÍ VÝZKUMU/TECHNOLOGIE

V rámci daného výzkumného tématu se zabýváme počítačovým modelováním komplexních molekulárních systémů. Zejména se věnujeme:

- **počítačovému modelování potenciálních nosičů léčiv na molekulární úrovni**, a to především pro genové terapie. Zejména se zde specializujeme na polymerní hyperbranched molekuly zvané dendrimery. V rámci spolupráce s domácími i mezinárodními pracovišti, zabývajícími se syntézou a experimentálním výzkumem dendrimerů pro medicínské účely, participujeme na výzkumu využití těchto molekul i pro další medicínské aplikace (virostatika, baktericidy). Krom modelování samotných dendrimerů či dendronů se zde, s ohledem na danou aplikaci, typicky jedná o modelování nejrůznějších molekulárních komplexů (obvykle ve vodném prostředí) obsahujících krom dendrimerních molekul např. oligonukleotidy či jiné molekuly transportované do buněk, proteiny či lipidové dvojvrstvy popř. lipozomy. Tyto komplexy se následně analyzují jak z hlediska jejich prostorového uspořádání, tak případně i z hlediska jejich stability či dynamiky interakčních procesů.

- **molekulárnímu modelování chemicky modifikovaných polymerních povrchů** a to v kontextu vývoje antimikrobiálních filtračních médií na bázi polymerních nanovláknenných textilií, modifikovaných antimikrobiální látkou. Na základě modelových výpočtů lze např. určit interakční energii mezi polymerním nanovláknem a antimikrobiálním aditivem, či zjistit (při dané koncentraci) rozložení antimikrobiálních ligandů na povrchu nanovláknů a to jak ve vzduchu, vodě či jiném prostředí. Tyto informace lze využít pro nalezení optimální kombinace polymer/aditivum pro danou aplikaci.

Samozřejmě jsme schopni na této úrovni modelovat a analyzovat i jiné molekulární systémy a případně poskytovat i další dostupné charakteristiky (např. transportní).

## POTENCIÁLNÍ UŽIVATELE

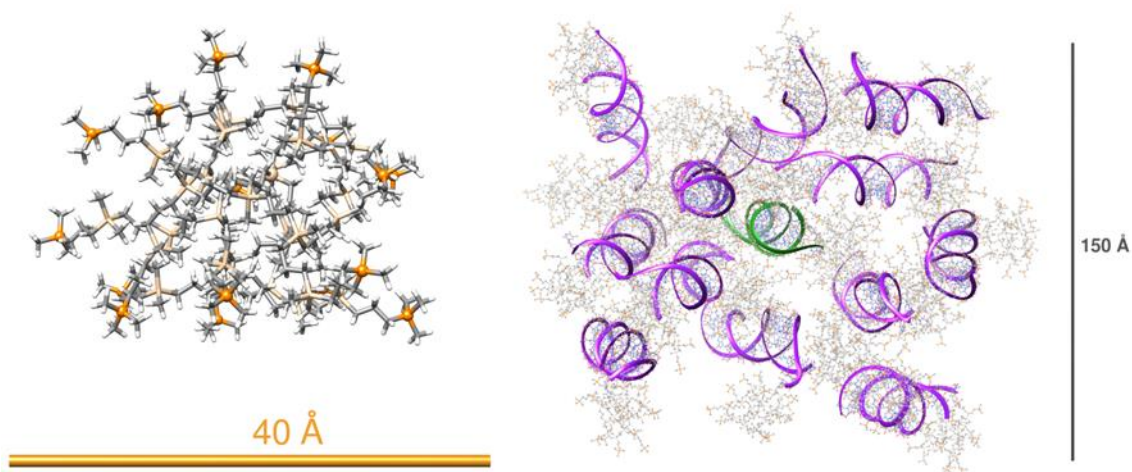
Uvítáme spolupráci s jakoukoli firmou či výzkumnou organizací z oblasti farmaceutického průmyslu či výzkumu, případně z oblasti výroby a vývoje povrchově modifikovaných nanovláknenných materiálů, ale i z dalších oblastí nanomateriálového designu.

## VÝHODY TECHNOLOGIE A VYUŽITÍ NA TRHU

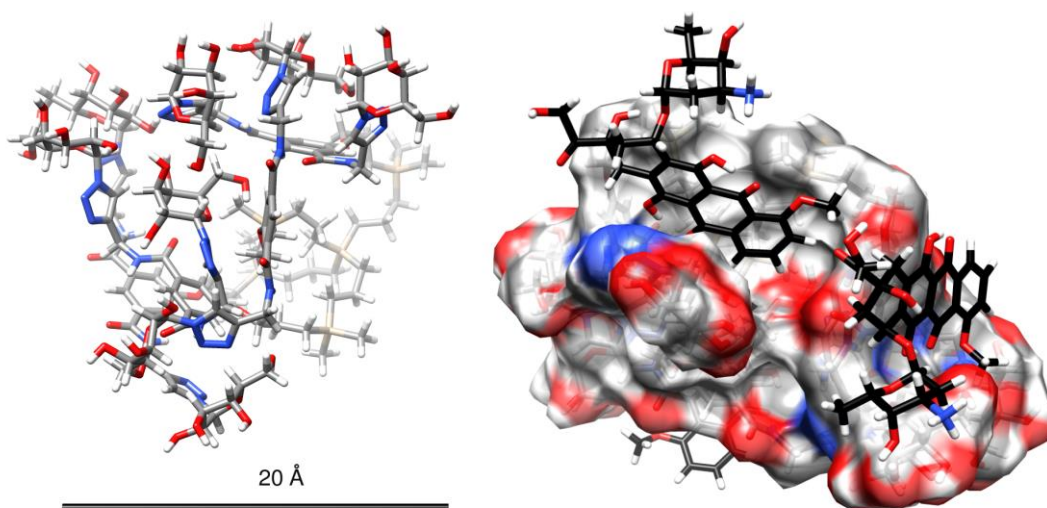
Molekulární simulace **umožňují studium molekulárních systémů na atomární úrovni** a poskytují tak detailní informace o chování a vlastnostech studovaného systému za daných podmínek. Tento přístup tak vhodně doplňuje popř. i částečně nahrazuje experimentální techniky. Velkou výhodou tohoto přístupu, kdy jsou reálné experimenty nahrazeny realistickými počítačovými experimenty, jsou také nízké ekonomické i časové nároky, což zde též výrazně navyšuje potenciál pro zefektivnění vývoje a výzkumu nejen ve výše specifikovaných oblastech.

UNIVERZITA J. E. PURKYNĚ V ÚSTÍ NAD LABEM  
Přírodovědecká fakulta

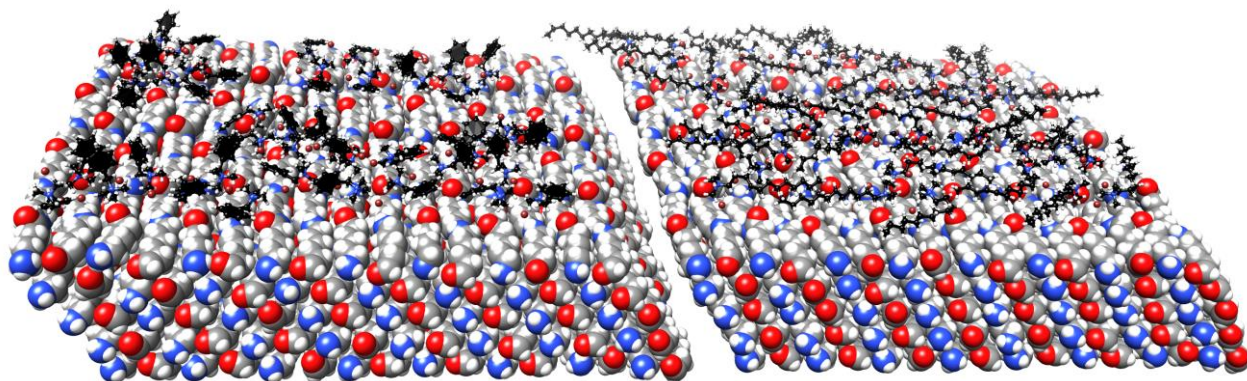
## DOPLŇUJÍCÍ INFORMACE



Obrázek 1: Počítačový model kationického karbosilanového dendrimeru (3. generace) s fosfoniovými (PMe<sub>3</sub>) koncovkami (vlevo) a nasimulovaný dendriplex sestávající ze 36 těchto dendrimerů a 13 siRNA molekul (vpravo). V obou případech se jedná o výsledky simulací ve vodném prostředí.



Obrázek 2: Počítačový model karbosilanového dendrimeru (1. generace) s galktózovými koncovkami (vlevo) a nasimulovaný komplex tohoto dendrimeru a 3 molekul doxorubicinu (vpravo). V obou případech se jedná o výsledky simulací ve vodném prostředí.



Obrázek 3: Namodelovaný povrch nylonového nanovlákná s antibakteriální povrchovou modifikací (benzyltrimethylamonium bromid – vlevo, 1-dodecyltrimethylamonium bromid - vpravo).