

TISKOVÁ ZPRÁVA

Praha 25. dubna 2023

Akademie věd ČR
Národní 1009/3, 110 00 Praha 1
www.avcr.cz

LÉK NEBO JED? NOVÁ KRYSTALOGRAFICKÁ METODA POMŮŽE FARMACEUTŮM I RYCHLEJŠÍM POČÍTAČŮM

Prohodit při obouvání levou botu za pravou je nepříjemné, ale zaměnit stejným způsobem při výrobě léčiv molekuly může být osudné – místo léku vznikne jed. Tomu pomůže zabránit nová metoda týmu mezinárodních vědců vedeného Lukášem Palatinusem z Fyzikálního ústavu Akademie věd ČR. Unikátní postup určování polohy atomů v krystalech publikoval v minulém týdnu časopis *Nature Chemistry*.

Rozlišit levou a pravou nohu je snadné, ale jak rozlišit dvě formy molekul, které jsou zároveň navzájem svými zrcadlovými obrazy, a přitom nejsou vidět ani nejlepším mikroskopem? Tým krystalografů z Fyzikálního ústavu AV ČR tuto otázku řeší dlouhodobě. Aktuální výsledek navazuje na desetiletí trvající předchozí výzkum a podíleli se na něm vedle kolegů ze Stockholmské univerzity zejména bývalí postdoktorandi Lukáše Palatinuse, kteří nyní působí na univerzitách v Brémách a Hannoveru.

„Kdybyste si osladili moučník sladidlem L-aspartam, bude sladký, pokud byste ale použili zrcadlově obrácenou molekulu D-aspartamu, sladkou chuť neucítíte. Určení této tzv. absolutní konfigurace molekul je klíčovou součástí analýzy krystalových struktur. Nově vyvinutá metoda poskytuje prostředek, jak ji rychle a spolehlivě určit, a to i z materiálů, u nichž to dosud nebylo možné nebo to vyžadovalo mnohem složitější techniky,“ vysvětluje přínos postupu Lukáš Palatinus.

1 + 1 = rychle, levně, spolehlivě

Ke zkoumání atomové struktury velmi malých krystalů, z nichž některé mají velikost mnohem menší než jeden mikrometr, vědci použili techniku zvanou trojrozměrná elektronová difrakce s kontinuální rotací. Tuto techniku spojili s přesným výpočtem efektů, které popisují chování elektronů při interakci s krystaly.

Předností této kombinace a také hlavním přínosem nové publikace v *Nature Chemistry* je, že přesné krystalové struktury včetně absolutní konfigurace získává snadněji, spolehlivěji, rychleji a levněji než jiné postupy. *„Určování polohy atomů v krystalech všech druhů materiálů má zásadní význam pro náš každodenní život – ovlivňuje nejen funkci léků, ale třeba také složení pracích prášků nebo vývoj nových součástek pro počítače,“* uvádí Lukáš Palatinus.

Kontakt pro média: **Markéta Růžičková**
Divize vnějších vztahů AV ČR
press@avcr.cz
+420 777 970 812

Petra Köppl
Fyzikální ústav AV ČR
koppl@fzu.cz
+420 603 706 597

Vyvinutou metodu si tým vědců nechal patentovat v Evropě, ale i ve Spojených státech a Číně, zatímco vytvořený software mohou akademické instituce využívat zdarma. Zájem o koupi softwaru a licenci k patentu projevuje i soukromý sektor, pořídít si ho chtějí především farmaceutické firmy, kterým pomůže určit absolutní konfiguraci například u přírodních produktů při výrobě nových léků. Pomůže zabránit podobným katastrofám způsobeným rozdíly v účincích zrcadlově převrácených molekul, jako byl například případ léku Contergan, který způsobil vývojové vady u novorozenců matek, jež lék v těhotenství užívaly.

Více informací:

Dr. rer. nat. **Lukáš Palatinus**

Fyzikální ústav AV ČR

palat@fzu.cz