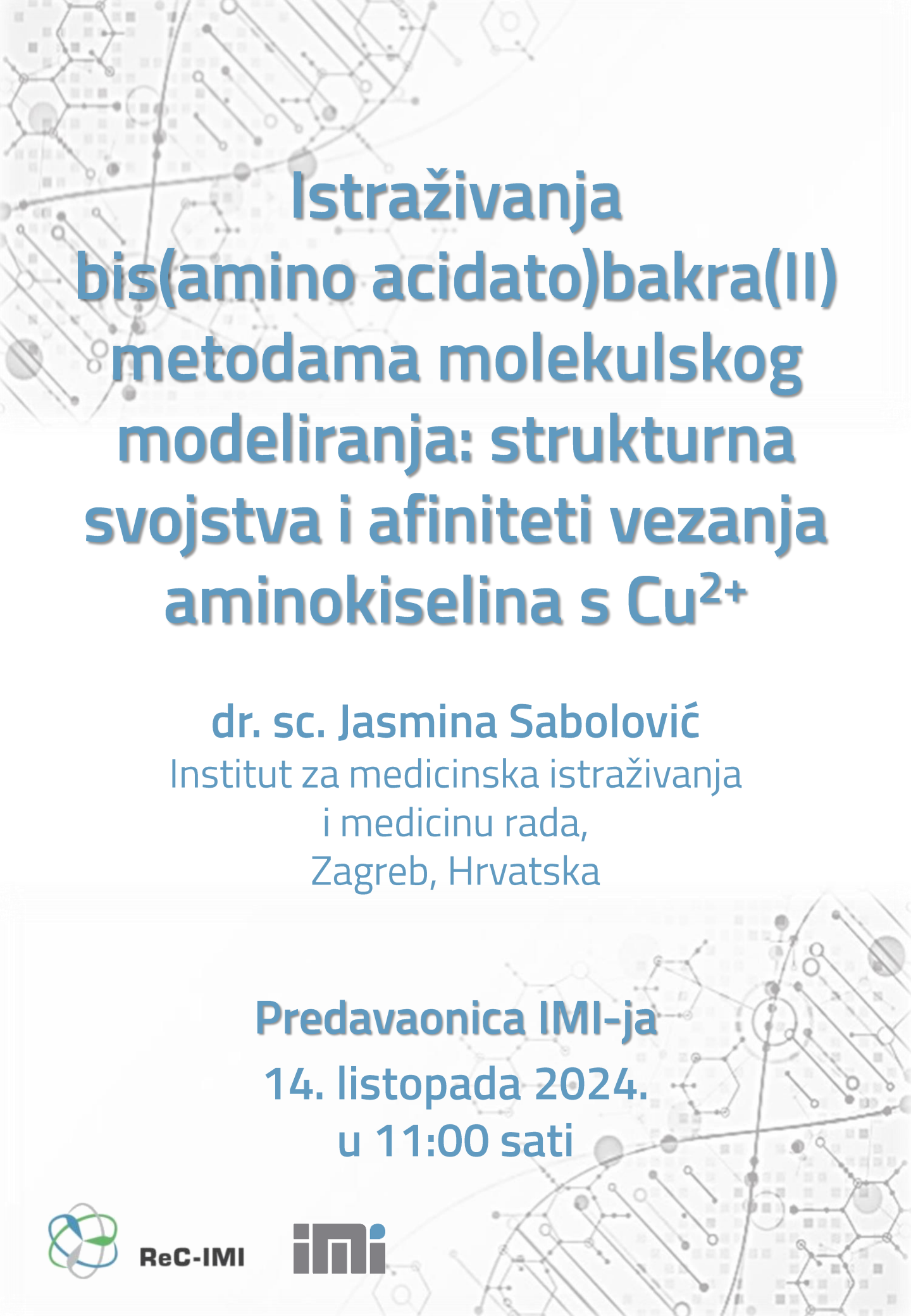




Istraživanja bis(amino acidato)bakra(II) metodama molekulskog modeliranja: strukturna svojstva i afiniteti vezanja aminokiselina s Cu^{2+}

dr. sc. Jasmina Sabolović

Institut za medicinska istraživanja
i medicinu rada,
Zagreb, Hrvatska

Predavaonica IMI-ja
14. listopada 2024.
u 11:00 sati



ReC-IMI

imi

Kolokvij Instituta za medicinska istraživanja i medicinu rada

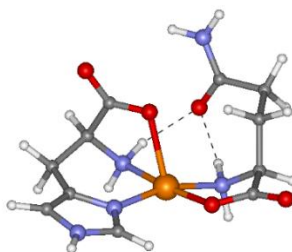
Naslov predavanja: Istraživanja bis(amino acidato)bakra(II) metodama molekuskog modeliranja: strukturna svojstva i afiniteti vezanja aminokiselina s Cu^{2+}

Predavač: dr. sc. Jasmina Sabolović, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada

Vrijeme i mjesto: 14. listopada 2024. u 11:00 h, predavaonica Instituta

Sažetak

Koordinacijski spojevi metalnih iona s bioligandima male molekulske mase istražuju se u Institutu od njegovog osnutka, prvo elektrokemijskim i termodinamičkim metodama, a od početka 1980-ih i molekulskim modeliranjem. Pioniri u modeliranju spojeva bis(amino acidato)bakra(II) $[\text{Cu}(\text{aa})_2]$ u Institutu i Hrvatskoj bili su Nenad Raos i Vladimir Simeon. Neutralni spojevi $\text{Cu}(\text{aa})_2$ poznati su od druge polovice 19. stoljeća, a intenzivnija istraživanja njihovih struktura započeta su 1960-ih godina. Istraživanja su bila motivirana spoznajama da su to biološki važni spojevi, koji kao sastojak krvne plazme mogu imati ulogu u procesima prijenosa i pohrane bakra u organizmu. Stereokemijski su raznovrsni i zanimljivi spojevi. Unatoč brojnim eksperimentalnim istraživanjima u otopinama tijekom posljednjih 50 godina, dobiveni su podaci samo o broju dušikovih atoma vezanih za bakar(II) te o *cis* ili *trans* položaju vezanih aminokiselina. Eksperimentalno nedostupna strukturna svojstva i procesi na molekularnoj razini mogu se odrediti u otopinama kvantno-kemijskom metodom teorije funkcionala gustoće i u kristalu empirijskom molekularno-mehaničkom metodom. U izlaganju će se dati pregled rezultata dobivenih u razdoblju 2019. – 2024. o predviđenim strukturnim svojstvima i afinitetima vezanja aminokiselina s Cu^{2+} u različite konformere i koordinacijske modove nekoliko stereokemijski zanimljivih i fiziološki važnih $\text{Cu}(\text{aa})_2$.



T +385 1 4862 556

E tcadez@imi.hr

A Ksaverska cesta 2, 10 000 Zagreb

PO Box 291, Croatia

W www.imi.hr

Životopis

Dr. sc. Jasmina Sabolović, dipl. ing. fizike, znanstvena je savjetnica iz područja prirodnih znanosti, polje fizika. Zaposlena je u Institutu za medicinska istraživanja i medicinu rada od 1987. godine. Doktorat iz prirodnih znanosti iz područja fizike stekla je na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu 1995. godine. Razvila je nekoliko molekulsko-mehaničkih modela i polja sila za metalne komplekse s bioligandima pod mentorstvom dr. sc. Nenada Raosa i prof. dr. sc. Kjelda Rasmussena na početku znanstvene karijere i dalje samostalno. Zadnjih godina bavi se pretežito kvantno-kemijskim računalnim istraživanjima. Znanstveno se usavršavala 1992./1993. u laboratoriju Kj. Rasmussena, Dansko tehničko sveučilište, Lyngby, Danska, uz jednogodišnju stipendiju Danske istraživačke akademije. Objavila je samostalno i u koautorstvu 36 znanstvenih radova u području bioanorganske kemije / biofizike. Bila je mentorica izrade 2 doktorska rada i vodila je 4 kompetitivna znanstvena projekta na Institutu (2001. – 2021).

T +385 1 4862 556

E tcadez@imi.hr

A Ksaverska cesta 2, 10 000 Zagreb
PO Box 291, Croatia

W www.imi.hr