



Katedry biochémie a genetiky
Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského
a občianske združenie *NATURA*
v spolupráci so
Slovenskou spoločnosťou pre biochémiu a molekulárnu biológiu

Vás pozývajú na 59. prednášku v rámci Kuželových seminárov:

Ing. Igor Tvaroška, DrSc.
Chemický ústav Slovenskej akadémie vied

Metódy molekulového modelovania v dizajne terapeutík

ktorá sa uskutoční 22. februára 2007 (ŠVTRTOK) o 14:00

**V PREZENTAČNOM CENTRE J.A. KOMENSKÉHO (u Amosa)
PRÍRODOVEDECKEJ FAKULTY UK (B1 – 313)**

<http://www.fns.uniba.sk/~kbi/kuzela>

Igor Tvaroška

Vzdelanie/Zamestnanie:

2004	Riaditeľ Chemického ústavu SAV
1995 –2001	GlycoDesign, Inc., Toronto "Director"
1994-1995	CERMAV, Grenoble, "Directeur de recherches"
1990-1992	Riaditeľ Chemického ústavu a člen Predsedníctva SAV
1989-1990	CERMAV, Grenoble, "Directeur de recherches"
1987	DrSc., Slovenská akadémia vied
1976 – 1977	Postdoktorand, Univerzita Montreal, Montreal
1972	PhD, CHTF SVŠT, Bratislava
1970	Chemický ústav SAV, Bratislava
1968	Ing. CHTF SVŠT, Bratislava



Publikačná činnosť:

Vedecká práca je zameraná na štúdium štruktúry a vlastností biologicky významných molekúl metódami molekulovej mechaniky a kvantovej chémie. Hlavný záujem sa sústreďuje na interpretáciu príčin stereoelektrónových efektov, rozvoj metód roztokových vlastností, kombináciou merania NMR a molekulového modelovania; modelovanie reakčných mechanizmov enzýmov; racionálny dizajn liečiv, QSAR a ADME/T predpovede. 128 pôvodných vedeckých prác v periodikách, z toho, 9 kapitol v zahraničných monografiách; 20 pozvaných prednášok na mezinárodných konferenciách; viac ako 1900 SCI citácií.

S. Kozmon, **I. Tvaroška**, Catalytic mechanism of Glycosyltransferases: HybridQuantum Mechanical/Molecular Mechanical study of the Inverting *N*-Acetylglucosaminyltransferase I. *J. Am. Chem. Soc.* 2006, 128, 16921;

I. Tvaroška, I. Andre, and J.P. Carver, Catalytic Mechanism of the Inverting *N*-acetylglucosaminyltransferase I: DFT Quantum Mechanical Study of the Reaction Pathway and Determination of the Transition State Structure, *Glycobiology* 2003, 13, 559;

T.-Y. Yen, B. A. Macher, S. Bryson, X. Chang, **I. Tvaroška**, R. Tse, S. Takeshita, A. M. Lew, and A. Datti, Highly conserved cysteines of mouse core 2 β 1,6 *N*-acetylglucosaminyltransferase I form a network of disulfide bonds and include a thiol that affects enzyme activity, *J. Biol. Chem.* 2003, 278, 45864;

I. Tvaroška, I. Andre and J.P. Carver *Ab Initio* Molecular Orbital Study of the Catalytic Mechanism of Glycosyltransferases. Description of Reaction Pathways and Determination of Transition States Structures for Inverting *N*-acetylglucosaminyltransferases. *J. Amer. Chem. Soc.* 2000, 122, 8762.

Metódy molekulového modelovania v dizajne terapeutík

- Ø Úvod
- Ø Čo to je dizajn liečiv?
- Ø Racionálny dizajn liečiv
- Ø Glykomika - glykoterapeutiká
- Ø Príklady –rakovina, chrípka
- Ø Biologická aktivita

