HETÉNYI CSABA

Pécsi Tudományegyetem
Általános Orvostudományi Kar
Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet

Cím: 7624 Pécs, Szigeti út 12.

KUTATÁSI TERÜLET BEMUTATÁSA

Számítógépes gyógyszertervezési eljárások fejlesztése és alkalmazása A gyógyszertervezés korai szakaszának kulcslépése a potens hatóanyag-molekulák megtervezése. Ez a folyamat ma már leginkább számítógépes (farmakoinformatikai) eljárások segítségével történik, amelyek képesek mind a nagy mennyiségű szerkezeti adat kezelésére, mind az összetett energetikai számítások elvégzésére. A farmakoinformatika eszköztárát mind a célpont-alapú, mind a ligandum-alapú tervezésben bevetjük és a doktori munka során új eljárásokkal bővítjük. A módszereket teszteljük és alkalmazzuk a farmakológia kurrens területein, mint például a fájdalomcsillapítás, a jelátviteli folyamatok szabályozása, az antivirális- és az epigenetikai alapokon nyugvó terápiák. Célpont-hatóanyag kölcsönhatások számítógépes vizsgálata: A számítógépes dokkolás a gyógyszertervezés kihagyhatatlan eszköze, amelyet gyógyszergyárak is széleskörűen alkalmaznak. A projekt a gyógyszer-célpont kölcsönhatások szerkezetének és energiájának számítógépes dokkolással történő előrejelzésére fókuszál. A módszer képességeit és korlátait is vizsgáljuk.

ELSAJÁTÍTHATÓ TECHNIKÁK

Számítógépes molekulamodellezés, molekulamechanika, molekuladinamika, kvantitatív szerkezet-hatás vizsgálatok statisztikai módszerei, programozás C-ben, shell scriptek írása.

VÁLOGATOTT KÖZLEMÉNYEK

Zsidó, B.Z., Börzsei, R., Pintér, E., **Hetényi, C.** (2021) Prerequisite Binding Modes Determine the Dynamics of Action of Covalent Agonists of Ion Channel TRPA1. **Pharmaceuticals 14:** 988

Zsidó, B.Z., **Hetényi, C.** (2021) The role of water in ligand binding. **Curr Opin Struct Biol 67:** 1-8

Zsidó, B.Z., Börzsei, R., Szél, V., **Hetényi, C.** (2021) Determination of Ligand Binding Modes in Hydrated Viral Ion Channels to Foster Drug Design and Repositioning. **J Chem Inf Model 61:** 4011-4022

Zsidó, B.Z., **Hetényi, C.** (2020) Molecular Structure, Binding Affinity, and Biological Activity in the Epigenome. **Int J Mol Sci 21:** 4134

Horváth, I., Jeszenői, N., Bálint, M., Paragi, G, **Hetényi, C.** (2019) A fragmenting protocol with explicit hydration for calculation of binding enthalpies of targetligand complexes at a quantum mechanical level. **Int J Mol Sci 20:** 4384