

ZSIDÓ BALÁZS ZOLTÁN



Pécsi Tudományegyetem
Általános Orvostudományi Kar
Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet

Cím: 7624 Pécs, Szigeti út 12.

BEMUTATKOZÁS

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.

ELSAJÁTÍTHATÓ TECHNIKÁK

Számítógépes molekulamodellzés, 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.