

OBSAH

1. Organická chemie a organismy	5
1.1. Úvod	5
1.2. Předmět bioorganická chemie	6
1.3. Organismy	9
1.3.1. Obecné znaky	9
1.3.2. Prokaryotické organismy	10
1.3.3. Eukaryotické organismy	14
1.4. Biologicky aktivní látky	19
1.5. Organická chemie v rukou člověka	20
2. Organické látky produkované přírodou	25
2.1. Úvod	25
2.2. Malé hydrofilní molekuly	26
2.2.1. Karboxylové kyseliny obecných biochemických pochodů	26
2.2.2. Aminokyseliny	29
2.2.3. Monosacharidy	30
2.2.4. Oligosacharidy	44
2.2.5. Glykosidy	47
2.2.6. Hydrofilní nízkomolekulární látky zvláštního významu	48
2.2.6.1. Nukleové báze	48
2.2.6.2. Polyoly	49
2.2.6.3. Aminoalkoholy	50
2.2.6.4. Aminoglykosidová antibiotika	52
2.2.6.5. Antibiotika skupiny tetracyklinu	58
2.2.6.6. β -laktamová antibiotika	59
2.2.6.7. Vitamíny rozpustné ve vodě	59
2.2.7. Rozdělovací koeficienty hydrofilních přírodních látek	65
2.3. Malé lipofilní molekuly přírody	
2.3.1. Úvod	66
2.3.2. Lipidy	66
2.3.2.1. Rozdělení lipidů	66

2.3.2.2. Jednoduché lipidy	67
2.3.2.3. Složené lipidy	70
2.3.3. Terpeny	72
2.3.3.1. Biogenese terpenů	72
2.3.3.2. Monoterpeny	77
2.3.3.3. Seskviterpeny a diterpeny	82
2.3.3.4. Triterpeny	86
2.3.3.5. Tetraterpeny	89
2.3.4. Steroidy	90
2.3.4.1. Úvod	90
2.3.4.2. Steroly	91
2.3.4.3. Žlučové kyseliny	92
2.3.4.4. Steroidní hormony	93
2.3.4.5. Aglykony kardiotonických glykosidů	97
2.3.4.6. Bufanolidy	98
2.3.4.7. Aglykony steroidních saponinů	99
2.3.5. Vitamíny rozpustné v tucích	100
2.3.6. Lipofilní antibiotika	104
2.3.6.1. Antimykotická antibiotika	105
2.3.6.2. Lipofilní antibakteriální antibiotika	107
2.3.7. Rozdělovací koeficienty lipofilních přírodních látek	108
2.4. Malé molekuly s obtížným odhadem hydrofobních vlastností	109
2.4.1. Glykosidy s lipofilními aglykony	109
2.4.2. Alkaloidy	109
2.4.2.1. Obecné vlastnosti alkaloidů	109
2.4.2.2. Alkaloidy fenylethylaminového typu	110
2.4.2.3. Pyrrolidinové alkaloidy	111
2.4.2.4. Pyridinové a piperidinové alkaloidy	111
2.4.2.5. Tropanové alkaloidy	112

2.4.2.6. Indolové alkaloidy	114
2.4.2.7. Chinolinové alkaloidy	118
2.4.2.8. Isochinolinové alkaloidy	120
2.4.2.9. Pyrrolizidinové alkaloidy	125
2.4.2.10. Chinolizidinové alkaloidy	126
2.4.2.11. Imidazolové alkaloidy	127
2.4.2.12. Purinové alkaloidy	127
2.4.2.13. Steroidní alkaloidy	128
2.4.2.14. Diterpenoidní alkaloidy	129
2.4.2.15. Tropolonové alkaloidy	130
2.4.2.16. Fyzikální vlastnosti alkaloidů	130
2.5. Makromolekuly přírody	
2.5.1. Úvod	132
2.5.2. Deoxyribonukleové kyseliny	132
2.5.3. Ribonukleové kyseliny	135
2.5.4. Bílkoviny	135
2.5.5. Polysacharidy	139
2.5.6. Aromatické vysokomolekulární sloučeniny	142
2.5.7. Kaučuk a gutaperča	143
3. Supramolekulární útvary přírody	
3.1. Úvod	144
3.2. Struktura buněčných stěn bakterií	144
3.2.1. Vlastní struktura buněčných stěn	144
3.2.2. Biosynéza peptidoglykanu	147
3.3. Buněčné stěny rostlin	151
3.4. Buněčné stěny hub	151
3.5. Buněčné membrány	152
4. Organické biomakromolekuly v akci	155
4.1. Biochemické pochody	155
4.1.1. Úvod do problematiky	155
4.1.2. Pochody syntetických laboratoří a přírody	157
4.2. Receptory a enzymy	159
4.2.1. Struktura bílkovin v receptorech a enzymech	159
4.2.2. Efekt proximity	161
4.2.3. Mechanismus působení hydrolas	163

4.2.4. Koenzymy	166
4.2.5. Inhibitory receptorů a aktivních míst enzymů	170
5. Biologicky aktivní látky	175
5.1. Přehled mechanismů působení biologicky aktivních látek	175
5.2. Mechanismy účinku chemoterapeutik a pesticidů	178
5.2.1. Obecné zákonitosti	178
5.2.2. Biologicky aktivní látky působící na buněčné stěny	179
5.2.2.1. Obecné otázky	179
5.2.2.2. Látky inhibující biosyntézu peptidoglykanu molekuly před zesíťováním molekuly	179
5.2.2.3. Inhibitory transpeptidasy při syntéze peptidoglykanu	182
5.2.3. Biologicky aktivní látky působící destrukce částí cytoplazmatické membrány	186
5.2.4. Biologicky aktivní látky působící v oblasti deoxyribonukleových kyselin	191
5.2.5. Biologicky aktivní látky působící v oblasti ribonukleových kyselin	199
5.2.6. Biologicky aktivní látky inhibující syntézu bílkovin	200
5.2.7. Biologicky aktivní látky interagující s chloroplasty	202
5.3. Mechanismus účinku biologicky aktivních látek založený na interakci s receptory	203
5.4. Osudy biologicky aktivních látek v organismu	211
6. Projektování nových struktur biologicky aktivních látek	220
6.1. Celková strategie	220
6.2. Optimalizace struktury	224
6.2.1. Celkový přehled přístupů	224
6.2.2. Přístup podle Hansche	228
6.2.3. Freeho-Wilsonova analýza	232
6.2.3.1. Základy přístupu	232

6.2.3.2. Řešení podle Freeho a Wilsona	233
6.2.3.3. Řešení podle Fujity a Bana	237
6.2.4. Kombinace Hanschova a Freeho-Wilsonova přístupu	238
6.2.5. Empirické metody v QSAR	239
6.2.5.1. Pohled na empirické přístupy	239
6.2.5.2. Fibonacciho optimalizace	239
6.2.5.3. Optimalizace pomocí simplexů	242
6.2.5.4. Optimalizační schemata	244
6.2.6. Aplikace chemometrických přístupů na vztahy mezi strukturou a aktivitou látek	247
6.2.7. Molekulární modelování	248
6.2.8. Použití operací logiky	249
6.2.9. Základní omezení v přístupech QSAR	252
7. Literatura	254
Rejstřík	257