

[Akceptuje](#)

W ramach naszej witryny stosujemy pliki cookies w celu świadczenia państwu usług na najwyższym poziomie, w tym w sposób dostosowany do indywidualnych potrzeb. Korzystanie z witryny bez zmiany ustawień dotyczących cookies oznacza, że będą one zamieszczone w Państwa urządzeniu końcowym. Możecie Państwo dokonać w każdym czasie zmiany ustawień dotyczących cookies. Więcej szczegółów w naszej [Polityce Prywatności](#)

[Portal](#) [Informacje](#) [Katalog firm](#) [Praca](#) [Szkolenia](#) [Wydarzenia](#) [Porównania międzylaboratoryjne](#)
[Kontakt](#)



[Laboratoria](#)
[.net](#)
[Innowacje](#)
[Nauka](#)
[Technologie](#)



[Logowanie](#) [Rejestracja](#) [pl](#)

Newsletter

zapisz się

Naukowy styl życia

Nauka i biznes

- [Nowe technologie](#)
- [Felieton](#)
- [Tygodnik "Nature"](#)
- [Edukacja](#)
- [Artykuły](#)
- [Przemysł](#)

[Strona główna](#) > [Informacje](#)

Komputerowy model antynowotworowej nanocząstki



Blue Gene - superkomputer firmy IBM odkrywa nowatorcki sposób badania interakcji. Naukowcy wykorzystali modelowanie komputerowe w celu wykonania precyzyjnej symulacji wpływu leku na zahamowanie enzymu stymulującego rozwój komórek rakowych na poziomie interakcji kwantowo-mechanicznej. Mają oni nadzieję, że dzięki swojej pracy odkryją sposób na blokowanie wszystkich białek z klasy powodującej nowotwory, bez tak wielu efektów ubocznych, które wywoływane są przez obecne leki.

Badanie, opublikowane pewien czas temu na łamach „Proceedings of the National Academy of Sciences”, stanowi jeden z wielu przykładów zastosowania komputerów w tworzeniu modelu interakcji leków z biologicznymi celami. Naukowcy mają nadzieję, że analiza rezultatów zastosowania leku atom po atomie pomoże ulepszyć jego mieszanę lub też nawet opracować całkowicie nowy środek.

Lek, który wykorzystano w badaniach to nanocząstka: 82 atomy węgla ułożone w kształcie tzw. piłki Bucky'ego, w której zamknięty jest pojedynczy atom metalu ciężkiego zwanego gadolinem. Początkowo używany jako środek kontrastowy w rezonansie, jednak naukowcy (niektórzy z nich są autorami nowych badań) wykazali, że ma właściwości hamujące przerzuty nowotworów. W nowych badaniach autorzy dowiedli, że dzięki jego cząstce spowolniono rozwój raka trzustki u myszy poprzez zablokowanie enzymów zwanych MMP, które odpowiedzialne są za rekonstrukcję naczyń krwionośnych w celu zapewnienia substancji odżywczych dla nowotworu.

Aby zbadać zmian, które wywołuje jon ciężkiego metalu w nanocząstce i enzymie, naukowcy musieli sprawdzić mechanikę kwantową interakcji. Nie było to możliwe bez superkomputera — w tym przypadku był to Blue Gene firmy IBM. „Takie obliczenia są bardzo skomplikowane”, przyznaje Ruhong Zhou, biofizyk z Watson Research Center IBM i główny autor badań. „Trzeba mieć ogromne moce przerobowe”.

Źródło: www.nanonet.pl

<http://laboratoria.net/aktualnosci/14776.html>



23-12-2024

[Zdrowych i Pogodnych Świąt Bożego Narodzenia](#)

Najserdeczniejsze życzenia zdrowych, radosnych i pogodnych Świąt Bożego Narodzenia.



23-12-2024

[Zapraszamy na wyjątkową edycję Targów PCI](#)

[Days 2025!](#)

Odbędą się one w dniach 11-13 czerwca w Expo XXI w Warszawie.



23-12-2024

[Zawał już dawno przestał być chorobą mężczyzn](#)

Kobiety często nie czują typowych bólów co skutkuje gorszymi wynikami.



23-12-2024

[Świąteczna apteczka](#)

Szczypta umiaru i coś na zgage



23-12-2024

[Radioaktywny pluton się nie ukryje](#)

Naukowcy znajdują go nawet na lodowcach



23-12-2024

[Złoty Medal Chemii przyznany po raz 14](#)

Wyłoniono autorów najlepszych prac licencjackich i inżynierskich.



23-12-2024

[Polacy są umiarkowanie prospołeczni](#)

Polacy chcą wspierać materialnie.



23-12-2024

Związek między traumą z dzieciństwa a zespołem jelita drażliwego

Pokazały badania polskich naukowców.

Informacje dnia: [Zdrowych i Pogodnych Świąt Bożego Narodzenia Zapraszamy na wyjątkową edycję Targów PCI Days 2025!](#) [Zawał już dawno przestał być chorobą mężczyzn](#) [Świąteczna apteczka](#) [Radioaktywny pluton się nie ukryje](#) [Złoty Medal Chemii przyznany po raz 14](#) [Zdrowych i Pogodnych Świąt Bożego Narodzenia Zapraszamy na wyjątkową edycję Targów PCI Days 2025!](#) [Zawał już dawno przestał być chorobą mężczyzn](#) [Świąteczna apteczka](#) [Radioaktywny pluton się nie ukryje](#) [Złoty Medal Chemii przyznany po raz 14](#) [Zdrowych i Pogodnych Świąt Bożego Narodzenia Zapraszamy na wyjątkową edycję Targów PCI Days 2025!](#) [Zawał już dawno przestał być chorobą mężczyzn](#) [Świąteczna apteczka](#) [Radioaktywny pluton się nie ukryje](#) [Złoty Medal Chemii przyznany po raz 14](#)

Partnerzy