

[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](#)

Mechanika kwantowa w projektowaniu leków



Określenie oddziaływań między białkiem i ligandem na podstawie danych krystalograficznych nie zawsze jest łatwym zadaniem. Metody z dziedziny mechaniki kwantowej mogą okazać się kluczem do dokładniejszego zbadania nieklasycznych oddziaływań między cząsteczkami.

Makrocząsteczki, na przykład białka, nie funkcjonują jako odizolowane jednostki. Przeciwnie, uczestniczą one w procesach biologicznych wraz z innymi związkami, w tym innymi białkami, ligandami cząsteczek i cząsteczkami rozpuszczalnika. Interakcje te opierają się na organizacji i rozpoznawaniu cząsteczek.

Dokładniej mówiąc, wiązanie między dwoma oddziałującymi ze sobą partnerami posiada komponenty entalpiczne i entropiczne. Innymi słowy, rozpoznawanie jest powiązane ze zmianami struktury i dynamiki obu odpowiedników. Do zrozumienia sił napędzających rozpoznawanie i interakcję potrzebny jest szczegółowy opis dynamiki wiązania.

Poznanie dynamiki wiązania makrocząsteczek ma ogromne znaczenie dla chemii medycznej, ponieważ umożliwia racjonalne projektowanie makrocząsteczek w oparciu o ich strukturę. Taki był też cel projektu IMPSCORE (Introducing stacking and halogen bonding effects into ligand-target interaction energy calculations), finansowanego ze środków UE.

Uczeni zajmowali się dokładnością obliczeń entalpii. Zgromadzili oni dane eksperymentalne dostępne w piśmiennictwie i określili parametry przy pomocy pomiarów kalorymetrycznych. Dane eksperymentalne i obliczenia z dziedziny mechaniki kwantowej miały na celu poprawę składnika entalpicznego w funkcjach oceniających.

Do analiz rozkładu energii wybranych systemów modelowych wykorzystano teorię funkcjonału gęstości. Naukowcy przeprowadzili szereg badań łańcuchów guaniny i ksantyny, a także struktur kwadropolowych z kombinowanymi wiązaniami halogenowymi i wodorowymi.

Przed realizacją projektu IMPSCORE powszechnie uważano, że wiązanie wodorowe określa formowanie się kompleksów białko-ligand. Wyniki omawianego badania sugerują, że wiązanie halogenowe może pełnić ważniejszą rolę w formowaniu się kompleksów. Uczeni ustalili ponadto, że fluorowcowanie nie wpływa w prosty sposób na hydrofobowy charakter związków ligandów.

Wiązanie halogenowe jest oddziaływaniem niekowalencyjnym, cieszącym się coraz większym zainteresowaniem w badaniach nad kompleksami białko-ligand. Cząsteczki fluorowcowane wykorzystywane są w wielu lekach w celu stworzenia wiązań halogenowych z cząsteczkami biologicznymi. Projekt IMPSCORE pokazał, że mogą one stanowić skuteczne narzędzie pozwalające na zwiększenie selektywności i powinowactwa wiązania.

Zgodnie z ustaleniami badaczy, wiązania halowego nie należy już uważać za oddziaływanie

niekowalencyjne z pewnym efektem hydrofobowym, ale bardziej za słabe kowalencyjne wiązanie chemiczne. Co ważne, prace te umacniają rolę wiązań wodorowych jako parametru dostrajającego w projektowaniu leków.

Źródło: www.cordis.europa.eu

<http://laboratoria.net/aktualnosci/26217.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 zgagę



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