

[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>



09-09-2024

Jak poradzić sobie z końcem wakacji?

Dobrym sposobem jest opracowanie planu na „po urlopie”.



09-09-2024

Zalecenia w sprawie mpox są racjonalne i adekwatne

Wytyczne dotyczące mpox są adekwatne do obecnej sytuacji.



09-09-2024

Przydatność organów do przeszczepu

Syntetyczna krew może istotnie wpłynąć na transplantologię.



09-09-2024

Naukowcy zbadali, jak powstają nowe słowa w mediach społecznościowych

Język ewoluuje w kontekście społecznym, a jego odmiany zawsze konkurują ze sobą.



09-09-2024

Telefony komórkowe nie powodują nowotworów mózgu

Wykazują naukowcy w najnowszych badaniach.



09-09-2024

[Ryzyko zawału i udaru mózgu u kobiet](#)

Z 30-letnim wyprzedzeniem zwykłym testem krwi można je wykryć.



09-09-2024

[Galaktyki są dużo większe, niż sądzono](#)

Galaktyka Andromedy już od dawna oddziałuje na Drogę Mleczną.



09-09-2024

[System inteligentnego zarządzania pojazdami nagrodzony przez...](#)

Nagrodzony przez Siemens i PW.

Informacje dnia: [Jak poradzić sobie z końcem wakacji? Zalecenia w sprawie mpox są racjonalne i adekwatne](#) [Przydatność organów do przeszczepu](#) [Naukowcy zbadali, jak powstają nowe słowa w mediach społecznościowych](#) [Telefony komórkowe nie powodują nowotworów mózgu](#) [Ryzyko zawału i udaru mózgu u kobiet](#) [Jak poradzić sobie z końcem wakacji? Zalecenia w sprawie mpox są racjonalne i adekwatne](#) [Przydatność organów do przeszczepu](#) [Naukowcy zbadali, jak powstają nowe słowa w mediach społecznościowych](#) [Telefony komórkowe nie powodują nowotworów mózgu](#) [Ryzyko zawału i udaru mózgu u kobiet](#) [Jak poradzić sobie z końcem wakacji? Zalecenia w sprawie mpox są racjonalne i adekwatne](#) [Przydatność organów do przeszczepu](#) [Naukowcy zbadali, jak powstają nowe słowa w mediach społecznościowych](#) [Telefony komórkowe nie powodują nowotworów mózgu](#) [Ryzyko zawału i udaru mózgu u kobiet](#)

Partnerzy