

[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](#)

Technologia symulacji pól siłowych DNA



DNA odpowiada za replikację, mutację i ewolucję, kodowanie oraz ekspresję genów. Nadejście nowych komputerów i oprogramowania, które symuluje strukturę tej niesamowitej cząsteczki może umożliwić poznanie, w jaki sposób osiąga ona ten poziom wielozadaniowości.

W przypadku obecnych procedur symulacji przy użyciu pól siłowych do reprezentacji DNA występują dwa istotne problemy. Klasyczne pola siłowe zaprojektowane do obliczania energii potencjalnej układu atomów mają znane odchylenia, które ograniczają ich dokładność. Ponadto procedury są ograniczone do badań układów w zakresie 100 par zasad, podczas gdy najprostsza cząsteczka DNA prokariotów, bez jądra komórkowego, jest miliard razy większa.

Nowy złoty standard symulacji DNA ma miejsce na poziomie atomu

W ramach projektu simDNA finansowanego ze środków UE opracowano technologię symulacji wieloskalowej, która może być stosowana w dowolnej skali DNA — począwszy od zasad azotowych nukleotydów o wielkości jednej dziesięciobilionowej metra po genom człowieka na poziomie jednego metra. Jak podkreśla dr Modesto Orozco, koordynator badań w projekcie simDNA, „Ogólnym celem była prezentacja pełnej gamy technologii w celu przedstawienia DNA od poziomu atomowego do poziomu zasad azotowych nukleotydów, w tym krótkich włókien chromatyny”.

Zespół projektu simDNA poczynił ogromne postępy w ciągu pięciu lat trwania projektu. Na poziomie atomowym poprzedni złoty standard symulacji DNA został zastąpiony nowym polem siłowym parmbc1. Wywołało to poruszenie wśród badaczy budowy i funkcji DNA, a otwarcie obiektu dla społeczności dało w efekcie ponad 350 przytoczeń w czasopismach naukowych.

Rozwiązywanie problemu zniekształceń oraz model mezoskopowy

Zniekształcenia DNA występują podczas przekazywania DNA innym cząsteczkom, co jest również nazywane multimodalnością, jak również w wyniku modyfikacji epigenetycznych, które mają zwykle miejsce ze względu na zewnętrzne warunki środowiskowe. Naukowcy opracowali i zaimplementowali model mezoskopowy służący do pomiaru skali między atomami, cząsteczkami i materiałami o wielkości kilku mikrometrów podczas tych zniekształceń.

Model mezoskopowy umożliwia również symulację odpowiednio długich fragmentów chromatyny z zasadami azotowymi nukleotydów, których unikatowe możliwości pakowania sprawiają, że cząsteczka może zmieścić się w ciasnych przestrzeniach i w dalszym ciągu wchodzić w interakcje z innymi cząsteczkami. Jedno z nowatorskich rozwiązań badawczych projektu simDNA zastosowanych w obliczu problemów dotyczyło struktury nukleosomu. „Odkryliśmy, że dostępne dane dotyczące położenia nukleosomów we włóknie są niskiej jakości. Ponadto częściowo rozwiązaliśmy problem gromadząc własne dane dotyczące małego układu modelowego (drożdży)” —

wyjaśnia Orozco.

Cząsteczki jako dynamiczne nośniki informacji i ich znaczenie dla przyszłości medycyny

DNA i RNA nie są jedynymi nośnikami do przekazywania kluczowych informacji, które odpowiadają za włączanie odpowiednich genów w odpowiednim czasie. Inne cząsteczki, które przechowują istotne dane, to m.in. białka, a w szczególności enzymy. W ramach projektu simDNA zbadano również zjawisko allosteryzmu, które polega na możliwości modulacji aktywności enzymatycznej, na przykład przez interakcję z małymi cząsteczkami.

Allosteryzm może mieć ogromne znaczenie w przypadkach związanych z aktywnością enzymatyczną, ponieważ może całkowicie ją zmieniać. Naukowcy zbadali kilka enzymów, które oddziałują na DNA. Jeden z nich, relaksaza, odpowiada za przekazywanie odporności na antybiotyki u gronkowca złocistego, gdy może przekazywać geny sąsiadującym bakteriom. Opublikowano pracę w czasopiśmie naukowym PNAS. Rozważana jest publikacja dwóch kolejnych prac dotyczących allosteryzmu w prestiżowym czasopiśmie naukowym.

Trudno jest znaleźć granice dla szeregu przyszłych zastosowań technologii simDNA do symulacji biomolekuł, ponieważ jest ich dosłownie mnóstwo. Orozco wskazuje ogromny wpływ na dziedzinę chorób złożony. „Wyznacznikiem dla przyszłych zastosowań tego typu obliczeń [symulacji] jest wpływ jaki mogą mieć na lepsze zrozumienie chorób o pochodzeniu epigenetycznym, szczególnie w przypadku złożonych patologii, takich jak nowotwory”.

Źródło: www.cordis.europa.eu

<http://laboratoria.net/aktualnosci/27950.html>



24-09-2024

[Migrena to choroba - można ją leczyć](#)

Migrena to poważna choroba neurologiczna.



24-09-2024

[Jeżeli zranimy się przy powodzi, uwaga na tężec](#)

Szczepionki powinny być dostępne bezpłatnie w placówkach.



24-09-2024

[I. Przychocka pełnomocnikiem ds. jakości](#)

kształcenia na studiach

Będzie współpracowała na rzecz doskonalenia jakości kształcenia.



24-09-2024

Będzie kolejna edycja maratonu programistów

Zgłoszenia do 7 października.



24-09-2024

Przez dwa miesiące Ziemia będzie miała dwa księżyce

Od 29 września do 25 listopada.



24-09-2024

Astma oskrzelowa popowodziową konsekwencją

Powiedział PAP prof. Bolesław Samoliński, alergolog.



24-09-2024

SpaceX planuje wystrzelenie 5 bezzałogowych misji na Marsa

Ma się to odbyć w ciągu dwóch lat.



24-09-2024

Potrzebne są globalne ustalenia odnośnie

mikroplastiku

Okazją do działania może być przygotowywany przez ONZ traktat.

Informacje dnia: [Migrena to choroba - można ją leczyć](#) [Jeżeli zranimy się przy powodzi, uwaga na](#) [tężec I. Przychocka pełnomocnikiem ds. jakości kształcenia na studiach](#) [Będzie kolejna edycja](#) [maratonu programistów](#) [Przez dwa miesiące Ziemia będzie miała dwa księżyce](#) [Astma oskrzelowa](#) [popowodziową konsekwencją](#) [Migrena to choroba - można ją leczyć](#) [Jeżeli zranimy się przy powodzi,](#) [uwaga na tężec I. Przychocka pełnomocnikiem ds. jakości kształcenia na studiach](#) [Będzie kolejna](#) [edycja maratonu programistów](#) [Przez dwa miesiące Ziemia będzie miała dwa księżyce](#) [Astma](#) [oskrzelowa](#) [popowodziową konsekwencją](#) [Migrena to choroba - można ją leczyć](#) [Jeżeli zranimy się](#) [przy powodzi, uwaga na tężec I. Przychocka pełnomocnikiem ds. jakości kształcenia na studiach](#) [Będzie kolejna](#) [edycja maratonu programistów](#) [Przez dwa miesiące Ziemia będzie miała dwa księżyce](#) [Astma oskrzelowa](#) [popowodziową konsekwencją](#)

Partnerzy