

[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 badaniach biochemicznych



Nowy program służący do obliczeń dynamiki kwantowej powinien pozwolić na przewyżczenie pewnych ograniczeń konwencjonalnej kwantowej dynamiki jądrowej. Może on być stosowany do systemów molekularnych dowolnej wielkości i jest szczególnie przydatny w biologii.

Szybki rozwój spektroskopii molekularnej umożliwił poznanie nowych szczegółów dynamiki jąder i elektronów, które trzeba zrozumieć w kontekście teorii kwantowej.

Do opisu zachowania cząstek w skali kwantowej stosuje się przede wszystkim równanie Schrödingera. Stosunkowo łatwo jest rozwiązać zależne od czasu równanie Schrödingera w sposób numeryczny dla układu składającego się z kilku jąder i odpowiadających im elektronów. Obliczenia takie stają się jednak trudne w przypadku interakcji większej liczby cząstek.

Metody klasyczne nie pozwalają na uchwycenie ważnych efektów kwantowych, takich jak tunelowanie protonu czy dynamika obszarów, w których ruch jąder i elektronów jest silnie sprzężony. Uczestnicy projektu DQDPROT (On-the-fly nonadiabatic quantum dynamics suitable for large biomolecules: Developing the DD-vMCG method) udoskonalili metodę DD-vMCG i zastosowali ją do systemów biologicznych, wybierając zielone białko fluorescencyjne (GFP) jako główny przedmiot badania.

Mechanizm działania GFP obejmuje absorpcję światła niebieskiego, co powoduje transfer protonów w stanie wzbudzonym (ESPT). Jest to jedyny znany ESPT występujący w biologicznie aktywnych cząsteczkach i choć został on dokładnie zbadany eksperymentalnie, jego mechanizmy nie są do końca określone.

Aby zbadać proces fluorescencyjny w sposób teoretyczny, potrzebne jest podejście oparte na dynamice kwantowej, jednak nawet prosty model musi uwzględniać co najmniej 50 atomów, przez co nie da się badać go przy pomocy metod konwencjonalnych.

Uczestnicy projektu DQDPROT napotkali pewne nieoczekiwane problemy po opracowaniu modelu i porównaniu go z obserwacjami. Mimo że nie udało się zrealizować wszystkich pierwotnych założeń, uczeni usprawnili znacząco działanie programu DD-vMCG.

Udoskonalono między innymi przetwarzanie macierzy. Znacząco usprawniono też obsługę bazy danych dotyczących energii, gradientów i hesjanów oraz zoptymalizowano jej działanie. Wdrożono procedurę aktualizacji hesjanów, co pozwala na dalsze przyspieszenie bezpośredniej dynamiki oraz ma szczególne znaczenie dla wymagających obliczeń stanów wzbudzonych. Umożliwi to dokonanie znaczących postępów w teoretycznym modelowaniu reakcji dynamicznych, znajdującym ważne zastosowania w chemii i biologii.

Wyniki tych prac, wraz ze szczegółowym przeglądem aktualnego stanu programu DD-vMCG, opisano w artykułach opublikowanych na łamach czasopism International Reviews in Physical Chemistry oraz Journal of Chemical Physics.

Źródło: www.cordis.europa.eu

<http://laboratoria.net/aktualnosci/25606.html>



29-11-2024

W Polsce żyje miasto ludzi uratowanych dzięki przeszczepom szpiku

Wskazał w rozmowie z PAP prof. Wiesław Jędrzejczak.



29-11-2024

Popularny lek na tarczycę może mieć związek z zanikiem kości

Wynika z nowych badań.



29-11-2024

W ostatnich 60 latach światowa produkcja

żywności stale rosła

Wynika z nowych analiz opublikowanych w PLOS ONE.



29-11-2024

Sztuczna inteligencja niesie zagrożenia dla rynku pracy

Podkreślali uczestniczący w konferencji poświęconej tej tematyce.



29-11-2024

Program naprawczy dla NCBR

Stwierdza Minister Wieczorek dla PAP.



29-11-2024

ICChF PAN z grantem KE

Utworzy ośrodek badań nad zastosowaniem nienaturalnych aminokwasów.



29-11-2024

Słoneczny sposób na zamianę “banalnego” metanu

Francuscy badacze opracowali katalizator.



29-11-2024

Algorytm poeta?

A\Zbadano, jak odbiorcy reagują na poezję autorstwa AI oraz człowieka

Informacje dnia: [W Polsce żyje miasto ludzi uratowanych dzięki przeszczepom szpiku](#) [Popularny lek na tarczycę może mieć związek z zanikiem kości](#) [W ostatnich 60 latach światowa produkcja żywności stale rosła](#) [Sztuczna inteligencja niesie zagrożenia dla rynku pracy](#) [Program naprawczy dla NCBR IChF PAN z grantem KE](#) [W Polsce żyje miasto ludzi uratowanych dzięki przeszczepom szpiku](#) [Popularny lek na tarczycę może mieć związek z zanikiem kości](#) [W ostatnich 60 latach światowa produkcja żywności stale rosła](#) [Sztuczna inteligencja niesie zagrożenia dla rynku pracy](#) [Program naprawczy dla NCBR IChF PAN z grantem KE](#) [W Polsce żyje miasto ludzi uratowanych dzięki przeszczepom szpiku](#) [Popularny lek na tarczycę może mieć związek z zanikiem kości](#) [W ostatnich 60 latach światowa produkcja żywności stale rosła](#) [Sztuczna inteligencja niesie zagrożenia dla rynku pracy](#) [Program naprawczy dla NCBR IChF PAN z grantem KE](#)

Partnerzy