

[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>



27-03-2025

[Jak otworzyć laboratorium?](#)

Laboratorium może być dobrym pomysłem na biznes.



26-03-2025

[Dziękujemy za odwiedziny na targach Labs Expo](#)

Dziękujemy wszystkim, którzy odwiedzili nas.



26-03-2025

[W przyszłości będziemy jedli mięso z drukarki](#)

Trójwymiarowy druk może stać się z czasem jednym z filarów produkcji.



26-03-2025

[Ruszył nabór na wspólne projekty przedsiębiorców i naukowców; w...](#)

W aż puli 66 mln zł.



26-03-2025

[Błonica - choroba groźna także dla dorosłych](#)

Po 40. roku życia choroba staje się równie groźna.



26-03-2025

[87% internautów uważa hejt za poważny problem społeczny](#)

W 2024 roku z hejtem zetknęło się 45 proc. internautów.



26-03-2025

[Nowe materiały do budowy okrętów wojskowych](#)

Naukowcy z Politechniki Wrocławskiej pracują nad nimi.



26-03-2025

[Mandimycyna - nowy potencjalny środek przeciwgrzybiczy](#)

Zabija grzyby odporne na wiele leków.

Informacje dnia: [Jak otworzyć laboratorium? Dziękujemy za odwiedziny na targach Labs Expo W przyszłości będziemy jedli mięso z drukarki Ruszył nabór na wspólne projekty przedsiębiorców i naukowców; w puli 66 mln zł Błonica - choroba groźna także dla dorosłych 87% internautów uważa hejt za poważny problem społeczny](#) [Jak otworzyć laboratorium? Dziękujemy za odwiedziny na targach Labs Expo W przyszłości będziemy jedli mięso z drukarki Ruszył nabór na wspólne projekty przedsiębiorców i naukowców; w puli 66 mln zł Błonica - choroba groźna także dla dorosłych 87% internautów uważa hejt za poważny problem społeczny](#) [Jak otworzyć laboratorium? Dziękujemy za odwiedziny na targach Labs Expo W przyszłości będziemy jedli mięso z drukarki Ruszył nabór na wspólne projekty przedsiębiorców i naukowców; w puli 66 mln zł Błonica - choroba groźna także dla dorosłych 87% internautów uważa hejt za poważny problem społeczny](#)

Partnerzy