

[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](#)

Naukowcy zbadali substancje, które mogą hamować koronawirusa

Naukowcy z Uniwersytetu Warszawskiego przebadali 15 milionów związków chemicznych, które mogłyby hamować aktywność białka odpowiedzialnego za obniżanie odporności

organizmu podczas COVID-19. Ostatecznie pulę związków zawęzili do 400, a część z nich testują już w laboratorium.

Wyniki prac zostały opublikowane w „International Journal of Molecular Sciences” (<https://www.mdpi.com/1422-0067/22/8/3957>)

Białko odpowiedzialne za obniżanie odporności organizmu i sprzyjające replikacji koronawirusa to PLpro i jest znane naukowcom od 2003 r., kiedy wybuchła epidemia SARS. Poprzez "atakowanie" białka PLpro różnymi związkami chemicznymi można szukać leku na chorobę COVID-19, wywoływaną przez koronawirusa SARS-CoV-2.

„Różne grupy naukowe szukały już związków, które działałyby jak leki na SARS-CoV-2. Do tej pory wyniki nie były satysfakcjonujące, dlatego wciąż szukaliśmy lepszych rozwiązań. Mieliśmy częściową wiedzę na podstawie wirusa SARS-CoV-1, który jest bardzo podobny. Nasze podejście różniło się dokładnością. Samodzielnie sprawdziliśmy też czy wyselekcjonowane związki nie są potencjalnie toksyczne dla ludzkiego organizmu” - mówi Adam Stasiulewicz, doktorant z Interdyscyplinarnego Laboratorium Modelowania Układów Biologicznych CeNT UW i Zakładu Chemii Leków Warszawskiego Uniwersytetu Medycznego, pierwszy autor artykułu.

Naukowcy wykorzystali metodę „machine learning” - czyli sztuczną inteligencję, która korzystając z algorytmu automatycznie poprawia swoje rezultaty poprzez nabywane doświadczenie.

„Wiedza fizyczna, biologiczna, chemiczna i farmakologiczna pozwoliła nam uchwycić wydaje się unikalne oddziaływania, które mogą być kluczowe w celu zaprojektowania cząsteczki pełniącej funkcję inhibitora. Robiliśmy to masowo, ale jednocześnie bardzo dokładnie - patrzyliśmy, który klocek może pasować do innego klocka” - tłumaczy prof. Joanna Sułkowska, kierująca Interdyscyplinarnym Laboratorium Modelowania Układów Biologicznych w CeNT UW, współautorka artykułu.

Prof. Sułkowska podkreśla, że komputer przetwarzał dane, ale selekcji dokonywał zespół badaczy, a więc było w tym procesie dużo indywidualnej pracy ludzkiej.

„Praca przebiegała wieloetapowo. Zaczęliśmy od 15 milionów związków, które analizowaliśmy za pomocą zaawansowanych narzędzi bioinformatycznych, jednak na każdym etapie to człowiek musiał podjąć decyzję, w którym kierunku i jak ma przebiegać kolejna iteracja. W ten sposób wyselekcjonowaliśmy 1 000 związków, a na końcu pulę zawęziliśmy do 400” - precyzuje prof. Sułkowska.

Naukowcy z Uniwersytetu Warszawskiego ściśle współpracują z zespołem prof. Marcina Drąga z Politechniki Wrocławskiej. W 2020 roku prof. Drąg z zespołem rozpracował działanie dwóch enzymów - proteazy SARS-CoV-2 Mpro i SARS-CoV-2-PLpro, których zablokowanie za pomocą odpowiedniego związku może powodować zahamowanie działania wirusa.

Obecnie założenia teoretyczne badaczy z UW są testowane laboratoryjnie. „Teraz wyniki naszych badań sprawdzamy doświadczalnie wraz z zespołem prof. Marcina Drąga z Politechniki Wrocławskiej, na podstawie grantu z European Molecular Biology (EMBO) na zakup kilku cząsteczek” - mówi prof. Sułkowska.

Badania teoretyczne zostały sfinansowane z grantu NCN „Szybka ścieżka dostępu do funduszy na badania nad COVID-19”. (PAP)

Źródło: pap.pl

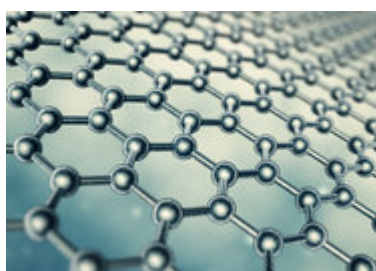
<http://laboratoria.net/aktualnosci/30594.html>



02-07-2024

[Ekran dotykowy bez problematycznego indu](#)

Tańsze i bardziej przyjazne środowisku.



02-07-2024

[Świat atomów i cząsteczek](#)

Jak dzięki różnym metodom obrazowania zobaczyć "całego słonia"



02-07-2024

[Żyjemy w czasach multitożsamości](#)

Ekspert o mediach społecznościowych.



02-07-2024

DLaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy?

Równość płci może mieć związek ze swobodą wyboru tego, co się je.



02-07-2024

Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu

Alarmuje Światowa Organizacja Zdrowia.



02-07-2024

Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu

Informuje "Nature".



02-07-2024

Tancerze są mniej neurotyczni niż ogół

populacji

Jednocześnie są bardziej ugodowi i ekstrawertyczni.



02-07-2024

Rząd planuje, aby minister mógł odwołać dyrektora NCBR

Dyrektor Narodowego Centrum Badań i Rozwoju będzie mógł zostać odwołany.

Informacje dnia: [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu](#) [Świat atomów i cząsteczek](#) [Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#) [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu](#) [Świat atomów i cząsteczek](#) [Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#) [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu](#) [Świat atomów i cząsteczek](#) [Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#)

Partnerzy