

[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



- [Nowe technologie](#)
- [Felieton](#)
- [Tygodnik "Nature"](#)
- [Edukacja](#)
- [Artykuły](#)
- [Przemysł](#)

[Strona główna](#) > [Edukacja](#)

Diptool

W dzisiejszych czasach, gdy odporność bakterii na antybiotyki stanowi globalne wyzwanie zdrowotne, naukowcy poszukują nowych sposobów zwalczania mikroorganizmów. Narzędzie, które ma przyspieszyć prace nad nowymi związkami antybakteryjnymi opracował dr Mateusz Rzycki z Politechniki Wrocławskiej.

Diptool - bo o nim mowa - to oprogramowanie przesiewowe do szybkiego określania powinowactwa środka przeciwdrobnoustrojowego na podstawie energii swobodnej do różnych typów błon lipidowych, a więc także błon komórkowych bakterii. Narzędzie pozwala na modelowanie interakcji międzycząsteczkowych, co umożliwia wizualizację trajektorii cząstek i analizę ich energii swobodnej.

Jest zdecydowanie szybsze niż klasyczne metody i ma przyjazny użytkownikowi graficzny interfejs; pracując na nim badacz może uruchamiać symulacje z zadanymi przez siebie parametrami i na bieżąco śledzić wyniki oraz różne statystyki w postaci graficznej.

Badania nad zupełnie nowymi związkami antybakteryjnymi są bardzo czasochłonne - tym bardziej, że do przetestowania są miliony cząstek. Nowe narzędzie może skutecznie przyspieszyć te prace.

Jak tłumaczy w rozmowie z PAP dr Rzycki, dzięki Diptool naukowiec może prowadzić wirtualne eksperymenty na komputerze, jeszcze zanim dany związek chemiczny zostanie zsyntetyzowany w laboratorium. Otwiera to zupełnie nowe możliwości, jeśli chodzi o poszukiwania nowych klas detergentów i środków przeciwdrobnoustrojowych. „Nasz model jest naprawdę prosty. Umożliwia szybkie wyłowienie pewnych cząstek z wielkich baz danych. W obecnych czasach takie bazy są absurdalnie ogromne, dlatego dobrze jest mieć takiego pomocnika, który nie angażując za bardzo naszych zasobów czasowych i komputerowych, jest w stanie wyodrębnić te najbardziej obiecujące związki” - podkreśla autor narzędzia.

Artykuły opisujące prace nad narzędziem Diptool oraz jego skutecznością dr Rzycki, wraz ze współpracownikami: prof. Sebastianem Kraszewskim i prof. Martą Gładysiewicz-Kudrawiec z Politechniki Wrocławskiej, opisał na łamach „Scientific Reports” (<https://doi.org/10.1038/s41598-024-55418-6>) oraz "Materials" (<https://doi.org/10.3390/ma14216455>).

"Diptool pozwala ocenić wybrane związki przeciwdrobnoustrojowych na podstawie ich własności. Dzięki niemu mogliśmy zaproponować udoskonaloną klasyfikację tych związków pod kątem ich interakcji z błonami komórkowymi i potencjalnej aktywności przeciwdrobnoustrojowej. Podejście to ma szczególną wartość w analizie cząstek i opracowywaniu nowych leków ukierunkowanych na szczepy bakteryjne odporne na antybiotyki" - tłumaczy dr Rzycki.

Tworzenie narzędzia rozpoczął ramach przygotowywania swojego doktoratu. Zaczął się wtedy zastanawiać się, czy istnieją wspólne cechy np. strukturalne, które wykazują wszystkie związki antybakteryjne. "Wraz z promotorem szukaliśmy parametrów, które pozwolą ocenić, że związek A jest skuteczniejszy wobec jakiejś bakterii niż związek B" - wyjaśnia rozmówca PAP. Metod takich poszukiwań jest wiele, jednak naukowcy nie byli z nich zadowoleni. Przede wszystkim dlatego, że nie dało się ich między sobą w pełni porównywać, ponieważ wykorzystywały różne protokoły eksperymentalne.

"Dlatego my, jako teoretycy, postanowiliśmy podejść do tego tematu inaczej, sprowadzając wszystko do wartości liczbowych. Wykorzystaliśmy metodę, która nazywa się QSAR" - mówi.

QSAR (quantitative structure-activity relationship) to technika, która w różny sposób stara się powiązać aktywność biologiczną z różnymi parametrami strukturalnymi danej grupy związków. W toku badań okazało się, że kilka spośród tych parametrów powtarza się i można je uznać za znaczące. Były to m.in. moment dipolowy związków, współczynnik podziału oraz rozmiar cząsteczki (stosunek długości do szerokości).

Następnie dr Rzycki zaimplementował te cechy w postaci numerycznej, korzystając ze znanych metod całkowania równań ruchu i zależności układów termodynamicznych. "Są pewne rozwiązania numeryczne, które pozwalają na zastosowanie tych praw do takich zamkniętych układów, z jakimi my mieliśmy do czynienia. W naszym wypadku ograniczyliśmy wszystko do oddziaływania dipoli ze sobą. Czyli ze wszystkich wcześniej wyodrębnionych parametrów skupiliśmy się wyłącznie na obserwacjach ruchu i energii układu" - opowiada.

Naukowcy przygotowali model uproszczonej błony lipidowej, jednak podeszli do tego trochę inaczej

niż się to zwykle robi. "Nasza cząstka była reprezentowana tylko przez jeden dipol o odpowiedniej wartości, a sama błona przez specyficzny układ dipoli, określony na podstawie dotychczasowych badań z zakresu dynamiki molekularnej - wyjaśnia specjalista. - Następnie badaliśmy, jak zachowuje się energia takiego układu, czyli jak jedne cząstki oddziałują na drugie".

Obserwując, jak dana cząstka wchodzi w interakcję z błoną i wyliczając energię, jaka się z tym wiąże, można było ocenić, czy dany związek jest dobrym kandydatem do dalszych testów eksperymentalnych, czy też nie. Jednym słowem: czy może być potencjalnym środkiem antybakteryjnym.

Dr Rzycki podkreśla, że dzięki Diptool cała ta procedura odbywa się o wiele szybciej niż pozwalały na to klasyczne metody. "Nasze narzędzie umożliwia formułowanie podobnych wniosków, ale zajmuje zdecydowanie mniej czasu. Przystudiowanie jednej cząsteczki zajmuje nam minuty lub godziny, a w przypadku tradycyjnych metod dynamiki molekularnej są to dni lub tygodnie - podkreśla. - Diptool bardzo przyspiesza identyfikację obiecujących związków, które następnie mogą być testowane eksperymentalnie przez badaczy".

Jeśli chodzi o skuteczność narzędzia, to jest ona wysoka. Jak mówi dr Rzycki, aktywność cząsteczek, scharakteryzowana w Diptool, była zbieżna względem wyników z dotychczas stosowanych, klasycznych narzędzi. "Nasze badania pokazują, że ta metoda jest obiecująca i wykazuje wysoką skuteczność" - podsumowuje naukowiec.

Źródło: pap.pl

<http://laboratoria.net/edukacja/32238.html>

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](#)

Partnerzy