

[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 umożliwi 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: [Migrena to choroba - można ją leczyć Jeżeli zranimy się przy powodzi, uwaga na tęczec 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 tęczec 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 tęczec 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