

[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](#)

Badanie numeryczne oddziaływań molekularnych w mózgu



W ramach jednego z europejskich projektów przeprowadzono badanie numeryczne, aby określić, w jakim stopniu manipulacja funkcjami neuroprzekaźników monoaminowych (MN) może posłużyć do leczenia chorób neurologicznych.

Układy monoaminergiczne (MS) są sieciami neuronów wykorzystującymi MN w celu regulacji ważnych procesów poznawczych. Neuroprzekaźniki monoaminowe to z kolei neuromodulatory zawierające grupę aminową i wywodzące się z aminokwasów aromatycznych, takich jak fenyloalanina, tyrozyna i tryptofan, a także z hormonów tarczycy.

Układy monoaminergiczne w mózgu odpowiadają za etiologię szeregu chorób neurodegeneracyjnych. Naukowcy uczestniczący w finansowanej ze środków unijnych inicjatywie COMPBAND (Computational studies of the biogenic amines of the brain for targeting neurological diseases) skoncentrowali się na dwóch aspektach MS. Pierwszym z nich był enzym znany pod nazwą monoaminooksydazy (MAO), który reguluje poziom amin w obszarze synaptycznym. Drugi to receptor histaminowy H₂, który wiąże biogenną aminę - histaminę - jako swój podstawowy endogeny ligand.

Przeprowadzone w ramach projektu badania pomogły wyjaśnić precyzyjny mechanizm molekularny leżący u podstaw aktywności katalitycznej MAO i dowiodły skuteczności nowo opracowanego dwuetapowego mechanizmu przenoszenia wykorzystującego wodorki. W ujęciu szczegółowym wykazano, że oba izoenzymy MAO - A i B - działają w oparciu o ten sam mechanizm wodorkowy. Odkrycie to ma szczególne znaczenie dla opracowywania nowych cząsteczek docelowych w funkcji inhibitorów monoaminooksydazy.

Izoenzymy MAO A i B wykazują skrajnie różne powinowactwo względem podłoża i inną wrażliwość na działanie inhibitorów. Inhibitory MAO A mogą zwiększać stężenie serotoniny, co sprawia, że są pomocne w leczeniu depresji. Z kolei inhibitory MAO B redukują degradację dopaminy i zwiększają kontrolę nad funkcjami motorycznymi u pacjentów cierpiących na chorobę Parkinsona. Tym samym zdobyta dzięki projektowi wiedza może być cennym wsparciem w procesie racjonalnej modyfikacji monoaminooksydazy, dostarczając wskazówek umożliwiających projektowanie silniejszych i bardziej selektywnych inhibitorów MAO.

Uczestnicy projektu przeprowadzili badanie doświadczalne i numeryczne, monitorując skutki deuteracji powinowactwa receptora histaminowego H₂ względem jednego antagonisty i trzech agonistów. Wywołane deuteracją zmiany w obrębie długości i siły wiązań wodorowych nie wpłynęły w znaczący sposób na wiązanie z antagonistą, natomiast zmieniły powinowactwo wszystkich agonistów. Badanie numeryczne obejmowało budowę modelu homologicznego receptora H₂ oraz modelowanie kwantowo-chemiczne energii swobodnej wiązań z empirycznym kwantowaniem ruchu

protonów. Przewidywany ogół wiązań histaminy i jej poddanego deuteracji analogu wykazał zgodność z wartościami liczbowymi uzyskanymi w drodze doświadczeń.

Podsumowując, przeprowadzona w ramach projektu analiza może posłużyć do opracowywania strategii zapobiegania neurodegeneracji oraz jej leczenia. W szczególności wesprze ona budowę całościowego kinetycznego modelu molekularnego procesu neurodegeneracji.

Źródło: www.cordis.europa.eu

<https://laboratoria.net/aktualnosci/28005.html>



12-05-2026

[Ruszyła IV edycja konkursu Pomosty Przyszłości](#)

Najlepsze pomysły łączące naukę z biznesem.



12-05-2026

[Kleszcz to tylko pośrednik](#)

Krętki Borrelia to częściowo „prezent” od gryzoni i ptaków



12-05-2026

Jak rower zmienił świat

Od drewnianej „maszyny biegowej” do emancypacji robotników i kobiet



12-05-2026

Polacy opracowują aparaturę dla teleskopów europejskiej misji...

Utworzą obserwatorium do badania fal grawitacyjnych.



12-05-2026

Badanie: portale społecznościowe nie chronią przed samotnością

Samotność ma liczne negatywne skutki zdrowotne.



12-05-2026

Norowirusy - biegunka brudnych rąk

Przenoszone drogą pokarmową norowirusy wywołują gwałtowne wymioty.



12-05-2026

Rak nie jest wskazaniem do przedwczesnego rozwiązania ciąży

W czasie ciąży można bezpiecznie prowadzić odpowiednie leczenie onkologiczne.



12-05-2026

Zakażenia w chirurgii to coraz większy problem

Konieczne jest wdrożenie skutecznego systemu opieki nad pacjentem.

Informacje dnia: [Ruszyła IV edycja konkursu Pomosty Przyszłości Kleszcz to tylko pośrednik Jak rower zmienił świat Polacy opracowują aparaturę dla teleskopów europejskiej misji kosmicznej](#) [Badanie: portale społecznościowe nie chronią przed samotnością](#) [Norowirusy - biegunka brudnych rąk](#) [Ruszyła IV edycja konkursu Pomosty Przyszłości Kleszcz to tylko pośrednik Jak rower zmienił świat Polacy opracowują aparaturę dla teleskopów europejskiej misji kosmicznej](#) [Badanie: portale społecznościowe nie chronią przed samotnością](#) [Norowirusy - biegunka brudnych rąk](#) [Ruszyła IV edycja konkursu Pomosty Przyszłości Kleszcz to tylko pośrednik Jak rower zmienił świat Polacy opracowują aparaturę dla teleskopów europejskiej misji kosmicznej](#) [Badanie: portale społecznościowe nie chronią przed samotnością](#) [Norowirusy - biegunka brudnych rąk](#)

Partnerzy