

### [Akceptuję](#)

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](#) [Szkozenia](#) [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](#) > [Nowe technologie](#)

## Komputerowy model antynowotworowej nanocząstki



Blue Gene - superkomputer firmy IBM odkrywa nowatorski sposób badania interakcji. Naukowcy wykorzystali modelowanie komputerowe w celu wykonania precyzyjnej symulacji wpływu leku na zahamowanie enzymu stymulującego rozwój komórek rakowych na poziomie interakcji kwantowo-mechanicznej. Mają oni nadzieję, że dzięki swojej pracy odkryją sposób na blokowanie wszystkich białek z klasy powodującej nowotwory, bez tak wielu efektów ubocznych, które wywoływane są przez obecne leki.

Badanie, opublikowane pewien czas temu na łamach „Proceedings of the National Academy of Sciences”, stanowi jeden z wielu przykładów zastosowania komputerów w tworzeniu modelu interakcji leków z biologicznymi celami. Naukowcy mają nadzieję, że analiza rezultatów zastosowania leku atom po atomie pomoże ulepszyć jego mieszankę lub też nawet opracować całkowicie nowy środek.

Lek, który wykorzystano w badaniach to nanocząstka: 82 atomy węgla ułożone w kształcie tzw. piłki Bucky'ego, w której zamknięty jest pojedynczy atom metalu ciężkiego zwanego gadolinem. Początkowo używany jako środek kontrastowy w rezonansie, jednak naukowcy (niektórzy z nich są autorami nowych badań) wykazali, że ma właściwości hamujące przerzuty nowotworów. W nowych badaniach autorzy dowiedli, że dzięki jego cząstce spowolniono rozwój raka trzustki u myszy poprzez zablokowanie enzymów zwanych MMP, które odpowiedzialne są za rekonstrukcję naczyń krwionośnych w celu zapewnienia substancji odżywczych dla nowotworu.

Aby zbadać zmiany, które wywołuje jon ciężkiego metalu w nanocząstce i enzymie, naukowcy musieli sprawdzić mechanikę kwantową interakcji. Nie było to możliwe bez superkomputera — w tym przypadku był to Blue Gene firmy IBM. „Takie obliczenia są bardzo skomplikowane”, przyznaje Ruhong Zhou, biofizyk z Watson Research Center IBM i główny autor badań. „Trzeba mieć ogromne moce przerobowe”.

Źródło: [www.nanonet.pl](http://www.nanonet.pl)

<https://laboratoria.net/technologie/14777.html>

**Informacje dnia:** [Studenci opracowali system zapobiegający zaśnieżeniu za kierownicą](#)  
[Wielofunkcyjne nanocząstki do produkcji wodoru](#) [Jak wybrać bezpieczną wodę podziemną do picia](#)  
[Technologia spersonalizowanego wzbogacania mleka dla wcześniaków](#) [Rozwiązania Watson-Marlow wspierają proces produkcyjny](#) [Torbay Pharma](#) [Mity na temat epilepsji](#) [Studenci opracowali system zapobiegający zaśnieżeniu za kierownicą](#) [Wielofunkcyjne nanocząstki do produkcji wodoru](#) [Jak wybrać bezpieczną wodę podziemną do picia](#) [Technologia spersonalizowanego wzbogacania mleka dla wcześniaków](#) [Rozwiązania Watson-Marlow wspierają proces produkcyjny](#) [Torbay Pharma](#) [Mity na temat epilepsji](#)

**Partnerzy**