

 Zawartość zarchiwizowana w dniu 2023-03-02

Modelowanie obliczeniowe umożliwia dogłębne poznanie fuzji błon komórkowych

Naukowcy z Francji, Wielkiej Brytanii i Austrii, wykorzystując moc obliczeniową rozproszonej infrastruktury europejskiej do zastosowań komputerowych o dużej wydajności DEISA, opracowali model kompleksu białkowego SNARE, spełniającego funkcję katalizatora fuzji dwóch błon. Mają...



Naukowcy z Francji, Wielkiej Brytanii i Austrii, wykorzystując moc obliczeniową rozproszonej infrastruktury europejskiej do zastosowań komputerowych o dużej wydajności DEISA, opracowali model kompleksu białkowego SNARE, spełniającego funkcję katalizatora fuzji dwóch błon. Mają oni nadzieję na stworzenie nowych możliwości

opracowywania leków.

- Badania podstawowe mają zasadnicze znaczenie, ponieważ istnieje kilka aspektów funkcjonowania białek i błon komórkowych, które nie są jeszcze w pełni poznane. Dzięki lepszemu zrozumieniu tych mechanizmów łatwiejsze będzie, na przykład, opracowywanie nowych czynników farmaceutycznych - wyjaśnia dr Marc Baaden, pracownik naukowy Laboratorium Biochemii Teoretycznej w Paryżu. - Badając zjawisko na poziomie atomowym, możemy głębiej poznać zachowanie błon komórkowych i białek, ogólnie i na większą skalę.

Z zaburzeniami funkcjonalnymi błon komórkowych związane są liczne choroby. W przypadku badanym przez dr. Baadena i jego kolegów błony komórkowe albo wcale nie ulegają fuzji, albo proces ten przebiega zbyt opornie. Za tę fuzję odpowiedzialny jest kompleks białkowy SNARE. Zaburzone działanie białek SNARE może na przykład skutkować cukrzycą dorosłych. Dlatego zrozumienie funkcjonowania SNARE może ułatwić opracowywanie nowych metod terapeutycznych. Poza medycyną z lepszego poznania działania białek skorzysta przemysł kosmetyczny i

nanotechnologie.

- Wiedza na temat działania błon komórkowych stworzy też możliwości w dziedzinie nanotechnologii. Pod względem technicznym badane przez nas białka są inteligentnymi maszynami, które doskonale wykonują zamierzone zadania, czyli dokonują ścisłej fuzji dwóch błon lipidowych - wskazuje dr Baaden.

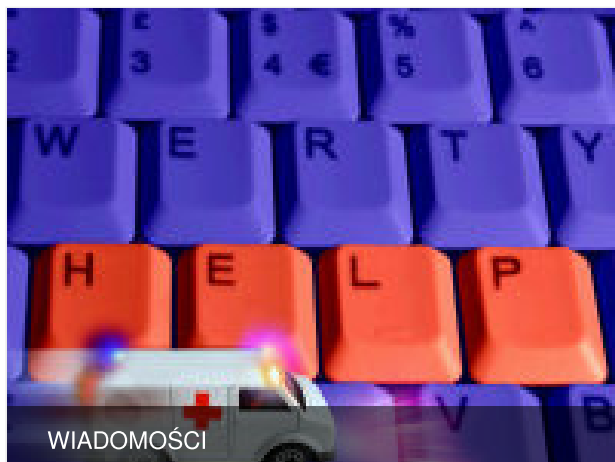
Choć opisując procesy na poziomie cząsteczkowym naukowcy często muszą się uciekać do pióra i papieru - techniki, którą dr Baaden nazywa "biologią rysunkową" i krytykuje za to, że łatwo wprowadza ona w błąd - specjaliści zaangażowani w omawiane badania uzyskali dostęp do sieci DEISA w ramach inicjatywy DECI (DEISA Extreme Computing Initiative), umożliwiającej im opracowanie wyjątkowo złożonego modelu.

- Cząsteczkowe modelowanie obliczeniowe, czyli symulacja, uwzględnia właściwości fizyczne w sposób bardziej realistyczny - twierdzi dr Baaden. - Dobry model cząsteczkowy umożliwia nam przeanalizowanie najdrobniejszych szczegółów systemu w kontrolowany sposób i w pożądanym okolicznościach. Możemy też łatwo zmieniać dowolnie właściwości modelu, by sprawdzać różne hipotezy - dodaje. W efekcie symulacja ułatwia badanie zdarzeń dynamicznych.

- Tradycyjnie modelowanie obliczeniowe było stosowane do symulowania pojedynczej błony - co jest i tak bardzo ambitnym zadaniem. Jednakże my dokonaliśmy symulacji połączenia dwóch błon lipidowych za pośrednictwem kompleksu białkowego, więc wyzwanie było jeszcze większe - mówi dr Baaden.

Według niego przyszłe metody modelowania obliczeniowego będą musiały łączyć bardzo dokładne modelowanie na poziomie atomowym z modelami gruboziarnistymi, symulującymi wydarzenie o większym zasięgu. Dodatkowo, jak podsumowuje dr Baaden, "ważna jest komunikacja między symulacjami na różnych poziomach. Pozwoli nam to dokładniej symulować detale o szczególnym znaczeniu, a także większe całości za pomocą modelu gruboziarnistego".

Powiązane artykuły



Superkomputerowe sieci łączą siły, by sprostać wyzwaniu w dziedzinie medycyny

14 Grudnia 2007



Czas obliczeniowy dla 45 projektów w europejskiej sieci komputerowej o wysokiej wydajności DEISA

5 Listopada 2007

Ostatnia aktualizacja: 6 Listopada 2007

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/28640-computational-modelling-allows-insights-into-cell-membrane-fusion/pl>

European Union, 2025