

AZ ELSŐ NEM-IZOM MIOZIN-2 (NM2) SPECIFIKUS INHIBÍTOR KIFEJLESZTÉSE



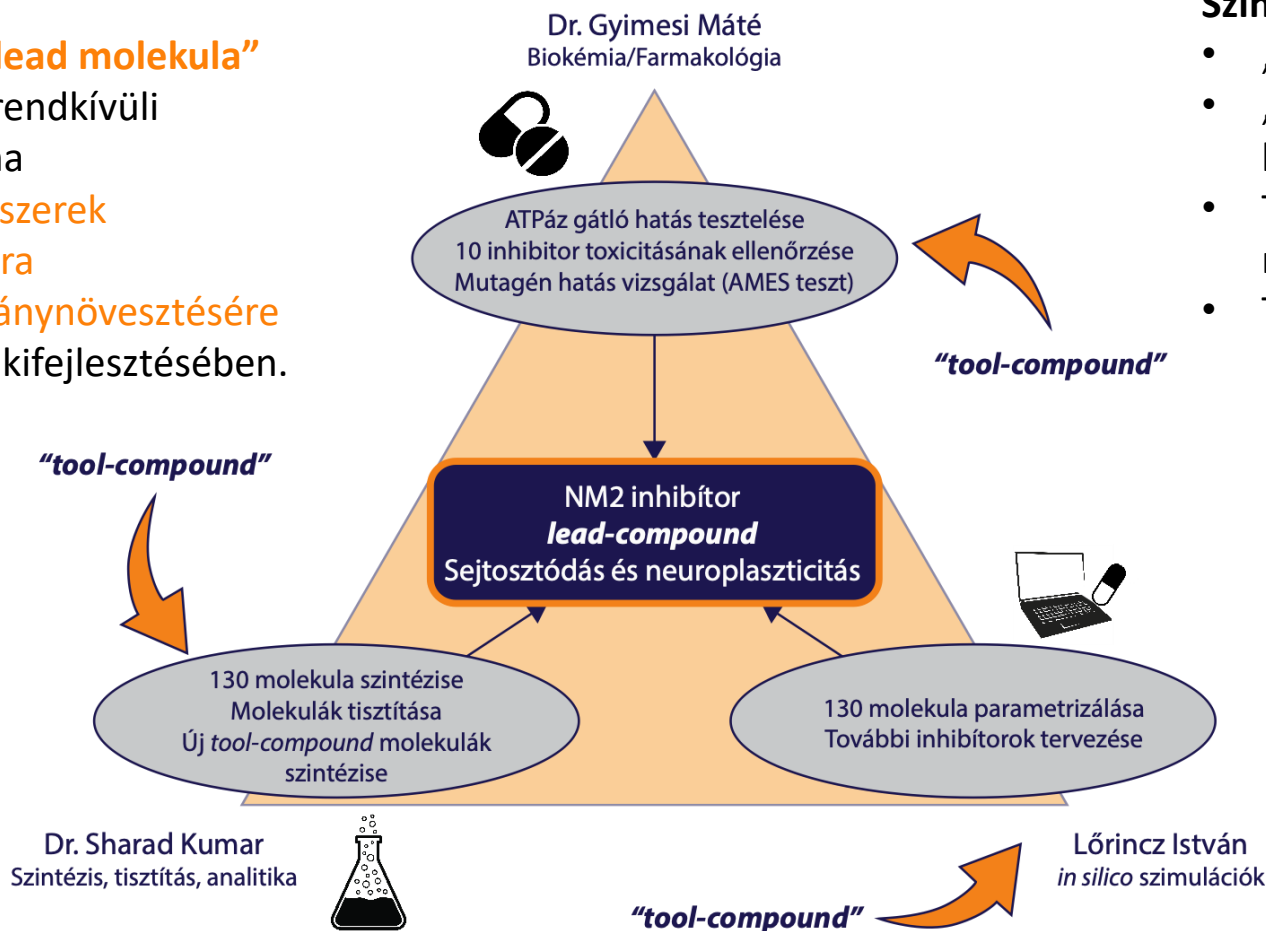
Sharad Kumar, ELTE Biokémiai tanszék
Gyimesi Máté, ELTE Biokémiai tanszék
Lőrincz István, ELTE Biokémiai tanszék

Célkitűzés:

NM2 specifikus „lead molekula”

előállítása, mely rendkívüli jelentőséggel bírna

- kemoterápiás szerek
- sejtregenerációra
- idegsejt nyúlványnövesztésére ható gyógyszerek kifejlesztésében.



Szintézis / módszer / eljárás:

- „tool-compound” származékok *in silico* tervezése
- „tool-compound” naftát származékok kombinatórikus kémiai előállítása
- Tisztított molekulák ATPáz gátlásának tesztelése 7 miozin-2 izofomán
- Továbbfejlesztés „lead” molekulává

Eredmény:

- 130+ naftát származék parametrizálása és molekuladinamikai szimulációja
- 100+ molekula szintézise, analitikája
- ATPáz tesztek elindítása NM2 izoformákon
- AMES mutagenitás teszt 1 molekulán
- Neurit növekedési tesztek optimalizálása 5 molekulával