

Zakład Chemii Nieorganicznej i Analitycznej
Pracownia Modelowania Molekularnego

Badanie porównawcze wpływu psychoaktywnych ligandów na receptor serotoninowy 5-HT_{2A}

Adam Margas

Kierownik: **prof. dr hab. Sławomir Filipek**

Plakat prezentuje wyniki badań nad wpływem hallucynogennych i niehallucynogennych ligandów na receptor serotoninowy 5-HT_{2A}. Metodologia badań opierała się na symulacjach dynamiki molekularnej Ligand Gaussian accelerated molecular dynamics (LiGaMD) i analizach z wykorzystaniem dostępnych lub autorskich skryptów modelowania molekularnego.^[1] Głównym problemem badawczym było zbadanie różnic w oddziaływaniu 4 ligandów (serotonina, psylocyna, LSD, lizuryd) z kieszenią wiążącą receptora oraz przeanalizowaniu ich wpływu na strukturę receptora. Plakat zawiera opis baz danych i programów niezbędnych do przygotowania symulowanych układów. Wyniki analiz są przedstawione w postaci wykresów uzyskanych za pomocą skryptów wykorzystujących dedykowane bibliotek Python. W części dedykowanej dyskusji uzyskane wyniki i wnioski są zestawione z hipotezami znalezionymi w literaturze.

Literatura:

[1] Miao Y, Bhattarai A, Wang J., Journal of chemical theory and computation. 2020 Jul 21;16(9):5526-47.