

Folyamatban levő Ph.D. munkák

Témavezető: Ötvös Ferenc

Doktori Iskola: SZTE ÁOK Elméleti Orvostudományok Doktori Iskola

Ph.D. hallgató: Varga Zsuzsanna

Témacím: Ligandum-karakter és receptor specifitás modellezése az opioid rendszerbe

A kutatási téma leírása: A fájdalomcsillapításban játszott szerepe miatt az ópiát rendszer kikerülhetetlenül részt vesz az orvoslásban. Az önmagában is összetett, négyféle receptorból álló rendszer, a különböző fiziológiai folyamatokban való részvétele bonyolult módon alakítja a hatás-mellékhatás mérleget. Ennek javítása az egyes receptorokon kifejtett farmakológiai hatások (agonizmus, antagonizmus, inverz- és parciális agonizmus) megértésével lehetséges, amit *in silico* módszerekkel kidolgozott atomi szintű modellel kívánunk elérni. A modell főbb elemei a különböző opioid ligandumoknak a már ismert aktív és inaktív receptor szerkezetekben mutatott atomi kölcsönhatási és kötődési energia mintázata mind a négy opioid receptorra. Mindezeket modellezett receptor állapotokra is kiterjesztjük.