

Fermentų slopiklių biojutikliai

Dauguma vaistinių medžiagų, naudojamų ligoms gydyti, yra mūsų organizmo fermentų grįžtamieji slopikliai. Fermentų slopiklių paieška yra sudėtingas procesas, jungiantis moderniąją bioinformatiką, chemiją, biofiziką ir biologinius bandymus. Šis procesas leidžia rasti medžiagas, kurios prisijungia prie fermento ir slopina jo veiklą, taip gydydamos ligas ar reguliuodamos biologinius procesus. Taip pat elektrocheminiai metodai leidžia stebėti jungimąsi realiuoju laiku, kas yra didelis privalumas lyginant su tradiciniais optiniais metodais. Šios doktorantūros tikslas – pritaikyti elektrocheminius ir (arba) paviršiaus plazmonų rezonanso metodus naujų fermentų slopiklių paieškai. Pasitelkdami šiuos metodus, planuojame ieškoti naujų organinių junginių, kurie galėtų būti grįžtamieji acetilcholino esterazės ir monoamino oksidazių slopikliai. Šių fermentų slopikliai yra svarbūs gydant depresiją, Parkinsono ir Alzheimerio ligų bei kitus neurologinius susirgimus. Atrinktų medžiagų slopinimo savybės bus lyginamos su gerai žinomomis vaistinėmis medžiagomis. Taip pat bus atliekamas šių fermentų aktyviųjų centrų ir potencialių slopiklių sąveikos teorinis modeliavimas, siekiant nustatyti slopiklių struktūrines tendencijas.

Biosensors for Enzyme Inhibitors

Most medicinal substances used to treat diseases act as reversible inhibitors of enzymes within our body. The search for enzyme inhibitors is a complex process that integrates modern bioinformatics, chemistry, biophysics and biological testing. This process enables the identification of compounds that bind to an enzyme and inhibit its activity, thereby treating diseases or regulating biological processes. Furthermore, electrochemical methods enable the real-time monitoring of binding, which is a significant advantage over traditional optical methods. This doctoral project aims to apply electrochemical and/or Surface Plasmon Resonance methods to the search for new enzyme inhibitors. By employing these methods, we plan to identify new organic compounds that could serve as reversible inhibitors of acetylcholinesterase and monoamine oxidases. Inhibitors of these enzymes are crucial in the treatment of depression, Parkinson's, Alzheimer's diseases, and other neurological disorders. The inhibitory properties of the selected substances will be compared with well-known medicinal compounds. Additionally, theoretical modelling of the interactions between the active sites of these enzymes and potential inhibitors will be performed to identify structural trends among the inhibitors.

Mokslinis vadovas / supervisor:

Dr. Gintautas Bagdžiūnas