

Streszczenie

W wielu procesach biologicznych, np. replikacji DNA, transkrypcji i interferencji RNA, jednym z kluczowych etapów jest rozplatanie polinukleotydów.

Nanopory to wąskie (średnica rzędu 1-100 nm) kanały, powstałe w błonach biologicznych lub wytworzone w membranach syntetycznych. W nanoporowej spektroskopii sił (NFS) zmiana struktury analitu (np. rozplecenie spinki DNA) następuje jako efekt naprężeń mechanicznych pomiędzy obiema jego częściami po przyłożeniu napięcia. Zdarzenie takie rejestrowane jest w postaci skoku prądu jonowego.

Przedmiotem mojej pracy doktorskiej było opracowanie modelu CG (uproszczonego) dla DNA/RNA, który mógłby zostać wykorzystany w symulacjach dynamiki molekularnej rozplatania w nanoporach oraz jego zastosowanie do badania kinetyki rozplatania.

Walidacja opracowanego modelu wykazała znaczną zgodność zarówno z wynikami symulacji all-atom jak i danymi eksperymentalnymi. Model wykorzystano do zbadania kinetyki rozplatania spinki DNA w nanoporze nieorganicznym. Określono wartości napięcia rozplecenia w zależności od geometrii poru i przyłożonego napięcia, stwierdzono też, że podczas translukacji konieczne jest pokonanie dwóch barier energetycznych: związanej z rozplataniem i z dalszą translukacją.

Model może zostać również wykorzystany do badania translukacji innych polinukleotydów, dla porów o różnej geometrii i ładunku na powierzchni ścianek.