

Modelowanie i symulacje komputerowe agregacji peptydów i białek

Zaproszenie na wolontariat w grupie prof. Andrzeja Molskiego w Zakładzie Chemii Fizycznej



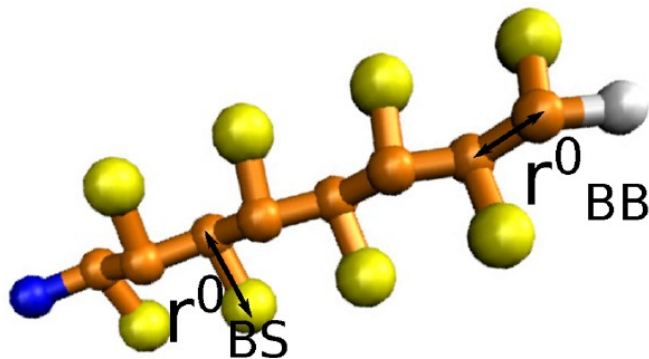
*Prof. dr. hab. Andrzej Molski
andrzej.molski@amu.edu.pl*

Aktualne tematy badawcze:

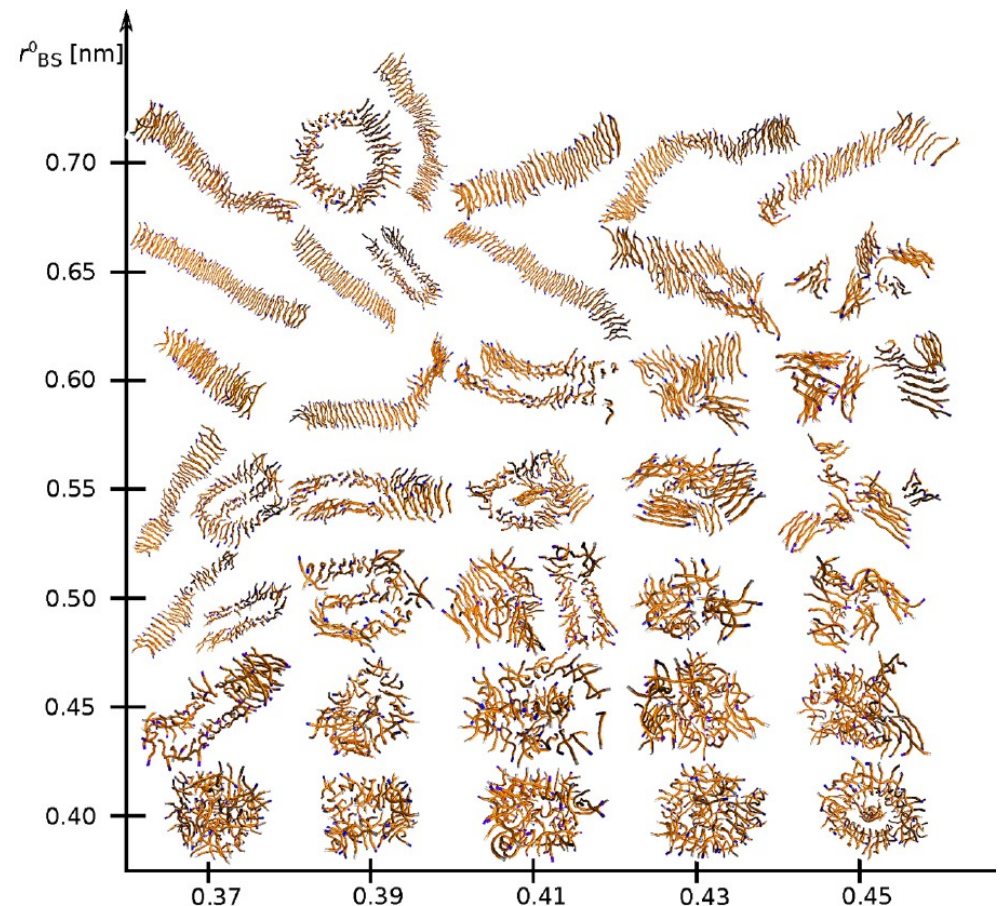
- Modelowanie i symulacje agregacji białek nieuporządkowanych (intrinsically disordered proteins).
- Modelowanie i symulacje rozdziału fazowego roztworów białek (protein liquid-liquid phase separation).
- Modelowanie i symulacje mechanizmów fibrylacji białek.

Na czym polega praca badawcza

- Przedmiotem prac jest analiza mechanizmu i kinetyki agregacji białek i ich fragmentów.
- Prace polegają na modelowaniu teoretycznym oraz na prowadzeniu symulacji komputerowych metodą dynamiki molekularnej, ich wizualizacji i analizie ilościowej.



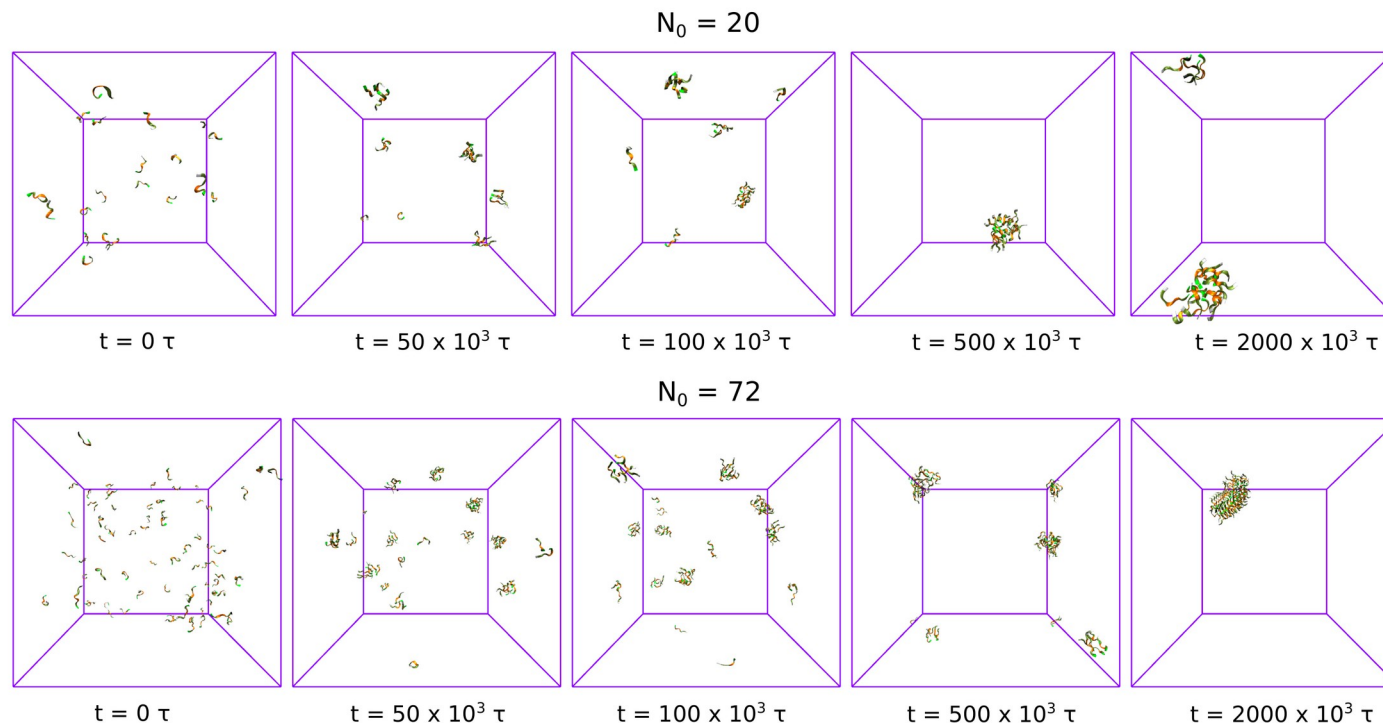
Rys. 1 Model peptydu z ośmioma resztami (dwa superatomy na resztę) będący przedmiotem symulacji.



Rys. 2 Różnorodne struktury agregatów, od amorficznych do fibrylarnych, powstałych w symulacjach.

Na czym polega wolontariat

- Wolontariat może polegać na aktywnym uczestnictwie w seminarium grupy, ale chętni mogą pracować nad własnymi projektami.
- Nie ma ograniczeń wstępnych odnośnie roku studiów lub ukończonych przedmiotów. Wolontariat nie kreuje żadnych zobowiązań po Państwa stronie (można go przerwać w każdym momencie).
- Wolontariat może prowadzić do interesujących prac licencjackich i magisterskich.



Rys. 3 Porównanie kinetyki agregacji dla $N_0 = 20$ i $N_0 = 72$ peptydów.

Dlaczego agregacja białek i peptydów

- Peptydy to biopolimery zbudowane z kilku do kilkudziesięciu aminokwasów połączonych ze sobą wiązaniami peptydowymi. Białka to biopolimery zbudowane ze stu lub więcej aminokwasów. Białka stanowią około 20% masy ciała dorosłego człowieka i spełniają liczne funkcje, np. uczestniczą w katalizie enzymatycznej, transporcie małych cząsteczek oraz regulacji przebiegu procesów w komórkach biologicznych.
- Peptydy i białka wykazują tendencję do agregacji, co jest przedmiotem intensywnych badań biochemicznych i biofizycznych. Na przykład, agregacja białek jest ściśle związana z patologicznymi zmianami w funkcjonowaniu organizmu, między innymi w mózgu, śledzionie lub wątrobie. Do chorób związanych z agregacją białek zalicza się między innymi choroby Alzheimera, Parkinsona i Creutzfelda-Jakoba.

Zapraszam!