

- 2015/18/E/ST4/00234 [2016-2020] Pole siłowe mechaniki molekularnej dla badania struktury, dynamiki oraz konformacji węglowodanów zawierających jednostki furanozowe – dr hab. W. Płaziński, prof. IKiFP

Węglowodany są jednymi z najistotniejszych związków chemicznych występujących w przyrodzie. Stanowią element strukturalny organizmów żywych (m.in. wchodzą w skład DNA i RNA), źródło energii dla nich (np. sacharoza) oraz odgrywają kluczową rolę w licznych, naturalnych procesach biochemicznych. Jeden z podstawowych podziałów węglowodanów obejmuje rozróżnienie pomiędzy cząsteczkami zawierającymi pierścienie sześciocłonowe (piranozy) a tymi z pierścieniami pięciocłonowymi (furanozy). W badaniu struktury i roli cząsteczek węglowodanów oraz przewidywaniu ich właściwości, jako alternatywy dla metod eksperymentalnych używa się również narzędzi chemii obliczeniowej, takich jak symulacje komputerowe. W przeciwieństwie do piranoz, węglowodany zawierające jednostki furanozowe nie są badane w ten sposób równie intensywnie. Jedną z przyczyn tego faktu jest brak odpowiednich narzędzi służących do efektywnego i dokładnego badania ich właściwości molekularnych na drodze chemii obliczeniowej. Niniejszy projekt ma na celu opracowanie właśnie takich narzędzi. W szczególności, chcemy stworzyć zestaw parametrów (nazywany polem siłowym) który może zostać użyty do przeprowadzania symulacji układów biomolekularnych zawierających furanozy. Opracowane pole siłowe zostanie zwalidowane w oparciu o dostępne dane eksperymentalne oraz obliczenie kwantomechaniczne, przetestowane w symulacjach najistotniejszych z punktu widzenia chemii/biochemii układów. Ostateczna jego wersja (udostępniona na zasadach niekomercyjnych) będzie mogła być używana do symulacji różnych układów zawierających furanozy, jak również biocząsteczki innego typu. Druga część projektu będzie polegała na przeprowadzeniu badań teoretycznych z wykorzystaniem ww. pola siłowego mających na celu poznanie właściwości strukturalnych, konformacyjnych oraz dynamicznych jakie charakteryzują cząsteczki cukrów zawierających jednostki furanozowe. Dodatkowo, planujemy zbadać molekularne aspekty oddziaływań pomiędzy furanozami a układami biomolekularnymi zawierającymi cząsteczki innego typu (np. błony lipidowe oraz proteiny).