

2019/35/B/ST4/01149 [2020-2024] Gruboziarniste modelowanie węglowodanów
- dr hab. Wojciech Płaziński, prof. IKiFP PAN

Węglowodany są jedną z kluczowych grup związków jakie są zaangażowane w budowę oraz funkcjonowanie żywych organizmów. W odróżnieniu od badań nad innymi biomolekułami, np. białkami, lipidami czy też kwasami nukleinowymi, analogiczne badania nad strukturą, konformacją oraz rolą węglowodanów w układach biologicznych są znacznie mniej zaawansowane.

Głównym celem projektu jest stworzenie narzędzi obliczeniowych do efektywnego badania zachowania węglowodanów oraz układów zawierających węglowodany drogą symulacji dynamiki molekularnej. Narzędzia te będą mieć charakter tzw. pól siłowych, czyli zestawów parametrów przybliżających oddziaływania jakie występują w realnych układach. W odróżnieniu od wielu istniejących pól siłowych, pragniemy skupić się na tzw. modelach gruboziarnistych (*coarse-grained*), które opierają się na uproszczonej reprezentacji cząsteczek, wprowadzając pseudoatomy symulujące zachowanie grup rzeczywistych atomów. Pozwala to na znaczne zwiększenie efektywności prowadzonych symulacji i, co za tym idzie, rozpatrywanie układów o większych rozmiarach oraz procesów przebiegających w szerszej skali czasowej.

Zamierzamy stworzyć spójny zestaw parametrów obejmujący szereg naturalnych węglowodanów, posiadających rozmaite funkcjonalizacje, różne typy wiązań glikozydowych, możliwe rozgałęzienia w łańcuchu, itp. Ww. parametry będą kompatybilne z tymi już istniejącymi i dedykowanymi innym rodzajom biomolekuł (białka, lipidy, kwasy nukleinowe...). Taka kombinacja w dalszej perspektywie umożliwi badania nad szerokim zakresem rzeczywistych układów w których węglowodany znajdują się w kontakcie z innymi naturalnymi cząsteczkami.

Dodatkowo, w ramach projektu, stworzone parametry zostaną użyte do badań nad wybranymi układami i procesami zachodzącymi z udziałem naturalnych polisacharydów.