

Nanotechnologia jest dziedziną wielodyscyplinarną, która łączy chemię, fizykę, biologię, medycynę oraz inżynierię. Przedmiotem badań tej dziedziny wiedzy są techniki tworzenia oraz wykorzystania różnych struktur na poziomie atomowym oraz małych cząstek, które nazywane są nanocząstkami. Jest ona obecnie jedną z najszybciej rozwijających się gałęzi nauki, jak i przemysłu. Nanocząstki od dawna są przedmiotem zainteresowania zarówno nauki, jak i przemysłu, ze względu na swoje wyjątkowe właściwości wynikające z małego rozmiaru. Wzrost wykorzystania nanocząstek w przemyśle powoduje, że cząsteczki te przedostają się do środowiska, a w efekcie do organizmów żywych. Są one również szeroko badane pod kątem dostarczania substancji leczniczych do miejsc docelowych np. do komórek nowotworowych. Obecnie badania coraz bardziej skupiają się na tworzeniu leków z nowoczesnych materiałów, którymi obecnie są nanocząstki, które mogą służyć jako nośniki leków, jednak nie jest jasne czy ich obecność w organizmie nie powoduje efektów ubocznych. Ze względu na coraz powszechniejsze użycie nanocząstek w życiu powszednim, prowadzi się coraz więcej badań na temat ich wpływu na organizmy żywe. Coraz częściej również pojawiają się debaty na temat możliwych skutków użycia nanocząstek. Dlatego tak ważną rolę w badaniach nad oddziaływaniem nanocząstek z białkami.

Celem niniejszego projektu jest opracowanie i sparametryzowanie gruboziarnistych modeli do badań nad oddziaływaniem nanorurek w środowiskach z peptydami i białkami. Pierwszym komponentem tych modeli będzie już istniejący gruboziarnisty model UNRES (UNited RESidue) łańcuchów polipeptydowych, który umożliwi przeprowadzenie badań nad układami białkowymi w dłuższej skali czasowej niż jest to możliwe w polach pełnoatomowych. W ramach niniejszego projektu zostaną opracowane i sparametryzowane dwa modele nanorurki: ciągły oraz ziarnisty. Jako pierwsze zastosowanie opracowanych modeli, w ramach wnioskowanego projektu planowane jest przeprowadzenie symulacji efektu koronowania nanorurek w środowiskach przez peptydy o sekwencjach bogatych w histydynę i tryptofan, jak również zostaną przeprowadzone badania nad oddziaływaniem nanorurek z receptorami TLR.

Model UNRES daje ponad 1000-krotne przyspieszenie obliczeń w stosunku do obliczeń pełnoatomowych. Dlatego opracowany w ramach wnioskowanego projektu model gruboziarnisty układów peptydowych i białkowych z nanorurkami w środowiskach umożliwi symulację większych układów w znacznie większej skali czasowej, pomijając drobne detale (np. w celu obliczenia trajektorii lotu kuli armatniej nie jest wymagana znajomość struktury atomowej kuli oraz otaczającego powietrza). Innymi słowami obliczenia będą wykonywane rutynowo na komputerze stacjonarnym bądź laptopie, zamiast wykorzystywać w tym celu dedykowane superkomputery takie jak np. ANTON. Takie symulacje przyczynią się do lepszego poznania mechanizmów, termodynamiki i kinetyki oddziaływania nanorurek w środowiskach z białkami komórkowymi przy niskim koszcie obliczeniowym. Umożliwi one również ocenę np. potencjalnej toksyczności dla komórek zdrowych i nowotworowych czy też powinowactwo do substancji leczniczych oraz ich transportu. W dalszej perspektywie opracowany model może zatem znaleźć zastosowanie w nanomedycynie.