

Nr rejestracyjny: 2015/18/E/ST4/00234; Kierownik projektu: dr hab. Wojciech Płaziński

Wglowodany s jednymi z najistotniejszych zwi zków chemicznych wyst puj cych w przyrodzie. Stanowi element strukturalny organizmów ywych (m.in. wchodz w skład DNA i RNA), ródło energii dla nich (np. sacharoza) oraz odgrywaj kluczow rol w licznych, naturalnych procesach biochemicznych. Jeden z podstawowych podziałów w glowodanów obejmuje rozró nienie pomi dzy cz steczkami zawieraj cymi pier cienie sze cioczłonowe (piranozy) a tymi z pier cieniami pi cioczłonowymi (furanozy).

W badaniu struktury i roli cz steczek w glowodanów oraz przewidywaniu ich wła ciwo ci, jako alternatywy dla metod eksperymentalnych u ywa si równie narz dzi chemii obliczeniowej, takich jak symulacje komputerowe. W przeciwie stwie do piranoz, w glowodany zawieraj ce jednostki furanozowe nie s badane w ten sposób równie intensywnie. Jedn z przyczyn tego faktu jest brak odpowiednich narz dzi słu cych do efektywnego i dokładnego badania ich wła ciwo ci molekularnych na drodze chemii obliczeniowej.

Niniejszy projekt ma na celu opracowanie wła nie takich narz dzi. W szczególno ci, chcemy stworzy zestaw parametrów (nazywany polem siłowym) który mo e zosta u yty do przeprowadzania symulacji układów biomolekularnych zawieraj cych furanozy. Opracowane pole siłowe zostanie zwalidowane w oparciu o dost pne dane eksperymentalne oraz obliczenie kwantowomechaniczne, przetestowane w symulacjach najistotniejszych z punktu widzenia chemii/biochemii układów. Ostateczna jego wersja (udost pniona na zasadach niekomercyjnych) b dzie mogła by u ywana do symulacji ró nych układów zawieraj cych furanozy, jak równie biocz steczki innego typu.

Druga cz projektu b dzie polegała na przeprowadzeniu bada teoretycznych z wykorzystaniem ww. pola siłowego maj cych na celu poznanie wła ciwo ci strukturalnych, konformacyjnych oraz dynamicznych jakie charakteryzuj cz steczki cukrów zawieraj cych jednostki furanozowe. Dodatkowo, planujemy zbada molekularne aspekty oddziaływa pomi dzy furanozami a układami biomolekularnymi zawieraj cymi cz steczki innego typu (np. błony lipidowe oraz proteiny).