

Nr rejestracyjny: 2015/18/E/NZ1/00689; Kierownik projektu: dr Stanisław Dunin-Horkawicz

Zastosowanie metod do wiadczałych pozwoliło ujawni , e białka, jeden z podstawowych składników maszynierii komórkowej, przyjmuj ró norodne formy strukturalne. Zbudowane s one z połączonych ze sob na ró ne sposoby, i na ró ne sposoby oddziałuj cych, mniejszych komponentów budulcowych. W znacznej cz ci białek komponenty budulcowe ró nych typów s przemieszane ze sob i tworzą zwarte, ró norodne struktury. Istniej jednak białka, w których pojedynczy typ komponentu powtórzony jest wielokrotnie, jeden za drugim, co skutkuje powstaniem wysoce regularnych konstrukcji. Jedn z najlepiej poznanych klas tego typu białek s tak zwane domeny splecionych helis . Regularno tych struktur pozwoliła na opracowanie modeli matematycznych, pozwalaj cych nie tylko opisa i wyrazi liczbowo poszczególne parametry ich budowy, ale tak e zaprojektowa na ich podstawie całkiem nowe struktury, niewystupuj ce w naturze. Chocia wzory parametryczne, b d ce matematycznym opisem domen splecionych helis , zostały opracowane jeszcze przez Francis'a Crick'a, to nadal stanowi one podstaw bada nad struktur domen splecionych helis i projektowaniem złożonych nanostruktur.

Celem niniejszego projektu jest stworzenie nowych uogólnionych modeli parametrycznych dla dwóch, innych ni splecione helisy , klas powtarzalnych struktur białkowych. Pierwsza z nich, splecione helisy typu , jest hipotetyczn struktur , która nie została dot d zaobserwowana w naturze, chocia jej strukturalny komponent budulcowy, helisa typu był ju badany. Nigdy jednak nie podjęto próby jego zwielokrotnienia, co umożliwiłoby zaprojektowanie nowego białka o regularnej i powtarzalnej strukturze. W przypadku drugiej klasy, helisy typu , sytuacja jest odmienna, gdy w przyrodzie występuje szereg struktur tego typu. Stworzenie modelu parametrycznego dla helisy pozwoli jednak usystematyzowa te znane struktury i pozna ogólne prawidłowości ich powstawania. To z kolei umożliwi zaprojektowanie nowych struktur helisy , nieobserwowanych dot d w naturze.

Realizacja proponowanego projektu będzie miała duże znaczenie dla badań nad struktur białek, gdy doprowadzi do stworzenia "warsztatu molekularnego", dzięki któremu możliwe będzie projektowanie i tworzenie nowych struktur białkowych o precyzyjnie zdefiniowanych cechach. Badania nad inspirowanymi naturą nanomateriałami są także istotne z innej perspektywy – pozwalają w praktyce zweryfikowa stopień naszego zrozumienia procesów ewolucyjnych, które doprowadziły do powstania białek istniejących w naturze.