

Oddziaływania w obrębie układów o znaczeniu biologicznym zależą głównie od elektrostatyki. Dlatego też dobry jej opis stanowi podstawę symulacji bio cząsteczek. W dzisiejszych czasach większość eksperymentów *in vitro* poprzedzona jest wnikliwymi badaniami *in silico*. Dokładność tych badań jest ograniczona przez fakt, że oparte na fizyce i dokładne obliczenia kwantowo-mechaniczne są niemożliwe do zastosowania ze względu na koszty obliczeniowe. Dlatego zastępowane są modelami opartymi na mechanice klasycznej. Słynny cytat Henri'ego Theil'a - „Model are to be used, not believed”, co można tłumaczyć jako: „Modele są od tego by ich używać, a nie w nie wierzyć”, przestrzega wszystkich przed zbyt pochopnym wyciąganiem wniosków z wyników metod, za którymi nie stoi silnie fizyczne podłoże.

Pola siłowe są powszechnie stosowanymi narzędziami do badań cząsteczek o znaczeniu biologicznym. Najpopularniejsze z nich - klasyczne, zyskując na czasie obliczeniowym tracą na dokładności. Cały czas trwają nieustanne poszukiwania najtrafniejszego modelu. W modelowaniu molekularnym za takie uchodzi narzędzie pozwalające na szybkie i dokładne obliczenia jednocześnie.

W naszym projekcie proponujemy rozszerzenie stosowalności modelu banku asferycznych pseudoatomów (University at Buffalo DataBank - UBDB); jedyne modelu mogącego z równym powodzeniem być zastosowanym w krystalografii rentgenowskiej, jak i w modelowaniu molekularnym. W zakresie pozyskiwania energii oddziaływań elektrostatycznych proponujemy przeprowadzić wnikliwe badania w celu lepszego zrozumienia jego wad i zalet. Wcześniejsze obliczenia wykazały jego wyższość w stosunku do analogicznych obliczeń z zastosowaniem pól siłowych jeżeli chodzi o dokładność oszacowania Ees. Proponowane badania pozwolą na stworzenie szeregu usprawnień, bądź nawet nowego modelu. Wyniki zostaną porównane do tych z użyciem pól siłowych, jak i odniesione do obliczeń kwantowo-mechanicznych.

Drugą częścią naszych badań będzie porównanie nowego modelu z danymi eksperymentalnymi. Dla uzyskanych kryształów dane z wysoko-rozdzielczej dyfrakcji rentgenowskiej będą porównane z gęstościami elektronowymi modelowanymi przy użyciu usprawnionego modelu.

Powyższe studia mają za zadanie stworzenie modelu o szerokim zakresie zastosowań.