

Około 50% struktur białek zdeponowanych w bazie PDB (Protein Data Bank) zawiera jony. W przypadku części z nich jony te nie występują naturalnie, lecz zostały wprowadzone w celu umożliwienia rozwiązania ich struktury przestrzennej metodami krystalografii rentgenowskiej. Jednak wiele zdeponowanych struktur posiada jony metali, które wstępują naturalnie, ponieważ pełnią one istotne funkcje biologiczne, np. jony metali alkalicznych i ziem alkalicznych są istotne w odpowiedzi komórkowej. Jony wpływają także na przestrzenną strukturę białka, stabilizując ją, a możliwe, że biorąc nawet czynny udział w procesie związania. Z tego względu badanie natury oddziaływań jonów z białkami jest istotnym elementem w badaniach pozwalających zrozumieć mechanizmy zachodzące w organizmach żywych.

Celem projektu jest opracowanie i wprowadzenie do gruboziarnistego pola siłowego UNRES (United RESidue) potencjałów opisujących oddziaływania pomiędzy białkami, a jonami metali ziem alkalicznych i alkalicznymi mającymi znaczenie biologiczne: wapniowymi, magnezowymi, sodowymi oraz potasowymi. Ze względu na konieczność zachowania elektroobojętności układu, w charakterze przeciwjonów zostaną wprowadzone także jony chlorkowe. Jednocześnie z wprowadzeniem nowych potencjałów pakiet UNRES zostanie również zmodyfikowany tak, aby można było prowadzić symulacje dynamiki molekularnej w obecności kationów. Wprowadzone potencjały zostaną przetestowane w oparciu o struktury znanych białek ze związanymi kationami. Drugim celem tego projektu będzie wykorzystanie pola siłowego UNRES wzbogaconego o nowe funkcje do zbadania wpływu jonów metali na proces związania i stabilność wybranych białek.

Model UNRES daje co najmniej ponad 1000-krotne przyspieszenie obliczeń w stosunku do obliczeń pełno-atomowych. Dlatego opracowane w ramach wnioskowanego projektu dodatkowe funkcje pozwolą na wykorzystanie go do określania miejsca wiązania jonów wapniowych, magnezowych, sodowych, potasowych oraz chlorkowych do białek (wiele białek wiążących jony, to duże, wielodomenowe makrocząsteczki). W przyszłości pozwoli to natomiast na zbadanie wielu istotnych procesów biologicznych, które zachodzą w wyniku oddziaływań białek z jonami (np. przewodzenie sygnałów czy transport jonów), a także na symulowanie tak skomplikowanych układów jak np. pompa sodowo-potasowa w błonie lipidowej.