

Przeznaczeniem białek z grupy przeciwdziałających zamarzaniu (ang. *antifreeze protein* - AFP) jest zabezpieczenie płynów zawartych w organizmach żywych przed zamarzaniem w sytuacji, gdy temperatura otoczenia spadnie poniżej zera stopni Celsjusza. Tworzące się podczas zamarzania kryształy lodu, a także towarzyszący zamarzaniu wzrost objętości, rozrywają błony komórek i (niszcząc przez to ich strukturę) powodują śmierć. Przeciwdziałanie zamarzaniu polega na utrzymywaniu płynów fizjologicznych w stanie przechłodzonym. Powszechnie akceptowany mechanizm działania białek AFP zakłada, że cząsteczki białka adsorbują się na powierzchni kryształów lodu powstających wewnątrz organizmu, co uniemożliwia ich dalszy wzrost.

Mimo starań badaczy wciąż nie udało się do końca wyjaśnić w jaki sposób białka przeciwdziałające zamarzaniu są w stanie rozpoznać kryształ lodu w otoczeniu znacznego nadmiaru ciekłej wody. Wydaje się, że znaczącą rolę w tym procesie może odgrywać woda solwatacyjna białek AFP. Struktura wody solwatającej obszar aktywny białek przeciwdziałających zamarzaniu zauważalnie różni się od struktury wody zawartej w sąsiedztwie pozostałych obszarów na jego powierzchni i wykazuje pewne podobieństwa do struktury lodu. Efekt ten może z jednej strony ułatwiać krzepnięcie wody znajdującej się między białkiem i lodem, prowadząc do ich nieodwracalnego związania, a z drugiej umożliwiać dokonanie rozróżnienia między wodą w stanie ciekłym i stałym, co jest niezbędne, aby białko mogło pełnić swoją funkcję.

Celem proponowanych badań jest zbadanie struktury i roli wody solwatacyjnej białek przeciwdziałających zamarzaniu w procesie wiązania się tych białek z powierzchnią lodu. Aby to osiągnąć przeprowadzone zostaną symulacje komputerowe układów, w których znajdować się będzie kryształ lodu oraz wybrane białko AFP, oddzielone od siebie warstwą ciekłej wody. Badania prowadzone będą dla kilku temperatur z zakresu 270 – 250 K oraz dla kilku różnych odległości między cząsteczką białka i lodem. Analiza uzyskanych wyników obejmować będzie właściwości strukturalne wody solwatacyjnej powierzchni aktywnej białka AFP oraz wody znajdującej się w bezpośrednim sąsiedztwie kryształu lodu.

Uzyskane wyniki pozwolą na poznanie szczegółów dotyczących procesu krzepnięcia wody znajdującej się w obszarze pomiędzy białkiem AFP i kryształem lodu. Będzie to kolejny krok na drodze do poznania roli wody solwatacyjnej w procesie wiązania się białek przeciwdziałających zamarzaniu z lodem oraz zrozumienia mechanizmu funkcjonowania tych białek.