

Woda jest podstawą życia na Ziemi. Około 60-70% masy dorosłego człowieka stanowi woda. Jej ubytki powodują poważne konsekwencje dla naszego organizmu, a znaczące odwodnienie prowadzi do śmierci. Jednym z kluczowych pytań jest, jaką rolę pełni woda w naszym organizmie. Czy woda to tylko rozpuszczalnik, czy może coś więcej?

Jednym z głównych budulców naszego ciała są białka, które są odpowiedzialne za kurczenie się mięśni, ruch, transport substancji w naszym organizmie, ochronę przed patogenami, a także stanowią elementy budulcowe oraz pełnią wiele innych funkcji. Białka są syntezowane w formie liniowego łańcucha, który następnie przyjmuje określony kształt w procesie zwijania. Wnętrze białka jest hydrofobowe, jednak cząsteczki wody są obecne wewnątrz struktur niektórych białek. Po co natura umieściła tam cząsteczki wody i jaką rolę pełnią? Jaką funkcję spełnia woda w procesie zwijania się białek? Na te pytania postaramy się odpowiedzieć badając na początku jak poszczególne reszty aminokwasowe oddziałują z wodą. Czy woda wiąże się silnie do tych cząsteczek czy raczej wymieniana jest szybko na innego partnera. Następnie zbadamy jak różne białka oddziałują się z wodą. Ponieważ jest to niezwykle trudne do zbadania przy użyciu metod eksperymentalnych, w tym projekcie badawczym użyjemy metod komputerowych do zbadania tego procesu. Dodatkowo badania komputerowe pozwalają na modyfikację właściwości wody i zbadania jakie cechy wody są tak istotne dla białek. Wykorzystamy rozwijany od ponad 20 lat model do symulacji białek o nazwie UNRES. Model ten wykazał swoją skuteczność wielokrotnie, my zaś planujemy jego dalszy rozwój by móc zbadać cząsteczki wody oddziałujące z białkami.

Kolejnym ważnym rozpuszczalnikiem występującym w naszym organizmie są lipidy. Cząsteczki te nie lubią oddziaływać z wodą i nie mieszają się z nią. Lipidy tworzą błony, które oddzielają wnętrze komórki od świata zewnętrznego, dzielą również komórkę na poszczególne segmenty. Aby prawidłowo pełnić swoje funkcje, komórki muszą jednak oddziaływać ze światem zewnętrznym. W drugiej części projektu będziemy badać jak funkcjonują białka, które są zanurzone w drugim najważniejszym rozpuszczalniku naszego organizmu – w lipidach. W jaki sposób przekazywany jest sygnał z zewnątrz do wnętrza komórki. Jak komórka decyduje jakie substancje wpuścić a jakich nie wpuszczać oraz jak działają toksyny białkowe, które niszczą błonę lipidową? Na te pytania postaramy się odpowiedzieć wykorzystując metody chemii obliczeniowej i program UNRES. W pierwszym etapie zbadamy jak poszczególne reszty aminokwasowe oddziałują z lipidami, następnie zaś zbadamy jak tworzą się pory w lipidach. Przeprowadzimy również symulacje w celu zbadania, jak przekazywany jest sygnał do wnętrza błony komórkowej.