

Strażnicy transportu flawonoidów: odszyfrowywanie selektywności transporterów ABCG w fizjologii wzrostu i obrony roślin metodami symulacji molekularnych – czyli jak rośliny wybierają, które molekuly przepuścić przez swoje "bramki"?

Cel projektu

Rośliny, podobnie jak ludzie, muszą transportować różne substancje przez swoje błony komórkowe – zarówno do wewnątrz komórki, jak i na zewnątrz. Za ten transport odpowiadają specjalne białka zwane transporterami, które działają jak "inteligentne bramki" - przepuszczają tylko określone molekuly, a inne blokują. Nasz projekt koncentruje się na dwóch bardzo podobnych białkach transportowych - ABCG61 i ABCG46 - które mimo 78% podobieństwa w budowie, pełnią zupełnie różne funkcje w życiu roślin.

Opis badań

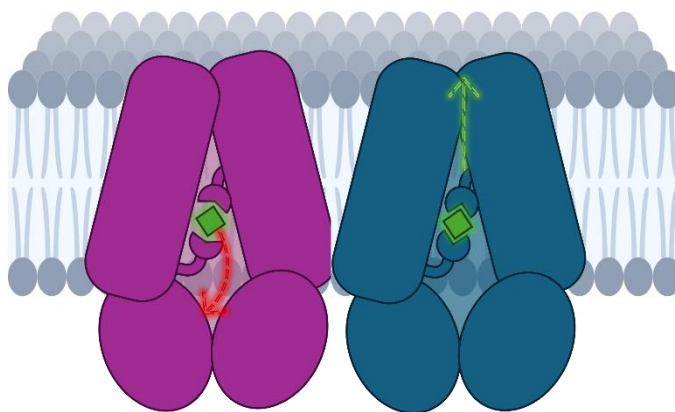
Co robimy? Używając zaawansowanych symulacji komputerowych, badamy jak dokładnie te białka "rozpoznają" i transportują swoje molekuly. ABCG61 pomaga roślinom współpracować z pożytecznymi bakteriami, podczas gdy ABCG46 chroni rośliny przed patogenami i szkodnikami.

Jak to robimy?

1. **Modelowanie 3D:** Tworzymy szczegółowe modele komputerowe obu białek w różnych etapach transportu, żeby obserwować, jak zmieniają swój kształt. To jak robienie serii zdjęć osobie w ruchu, żeby zrozumieć, jak się przemieszcza
2. **Śledzenie molekul:** Symulujemy podróż różnych cząsteczek przez "tunele" w białkach - od wejścia do wyjścia
3. **Identyfikacja "filtrów":** Szukamy kluczowych fragmentów białek, które decydują o tym, która molekula przejdzie, a która zostanie zatrzymana
4. **Porównanie mechanizmów:** Analizujemy różnice między ABCG61 i ABCG46, aby zrozumieć, dlaczego tak podobne białka mają różne funkcje

Czego się spodziewamy? Głównym celem jest znalezienie kluczowych miejsc – konkretnych aminokwasów (pojedynczych „cegiełek”, z których zbudowane jest białko), które działają jak "molekularne przełączniki" - decydują, czy dana cząsteczka zostanie przepuszczona czy zablokowana (**Schemat 1**). Następnie chcemy porównać te kluczowe pozycje między ABCG61 i ABCG46, aby sprawdzić:

- Które aminokwasy są odpowiedzialne za rozpoznawanie różnych molekul?
- Czy zamiana aminokwasów między białkami spowoduje zmianę ich funkcji transportowych?
- Czy możemy "przeprogramować" ABCG61 do transportowania substratów ABCG46 i na odwrót?



Schemat 1 Białka transportowe ABCG jako "inteligentne bramki". Po lewej białko blokuje transport cząsteczki, po prawej umożliwia jej przepływ. Różnice w kształcie kieszeni wiążących decydują o selektywności transportu.

Powody podjęcia tej tematyki – dlaczego to ważne?

Transport molekul przez błony komórkowe to jeden z najważniejszych procesów w biologii, ale mechanizmy selektywności pozostają słabo poznane. Rośliny mają wyjątkowo dużo białek transportowych rodziny ABCG, co wskazuje na ich kluczową rolę w adaptacji do życia na lądzie. Dzięki nowym metodom przewidywania struktury białek (AlphaFold3) możemy wreszcie szczegółowo zbadać te dotychczas niedostępne struktury.

Zastosowania praktyczne:

- **Zrównoważone rolnictwo:** Możliwość modyfikacji roślin tak, aby same lepiej chroniły się przed patogenami lub efektywniej współpracowały z pożytecznymi bakteriami – oznacza redukcję użycia pestycydów i nawozów sztucznych
- **Szerszy kontekst naukowy:** Poznanie mechanizmów działania roślinnych transporterów może przyczynić się do zrozumienia podobnych procesów u ludzi, szczególnie w kontekście oporności na leki w medycynie. Projekt może również otworzyć drogę do projektowania białek o pożądanych właściwościach transportowych w biotechnologii.