

2019
6-7 KWIETNIA

SYMPOZJUM
MŁODYCH
NAUKOWCÓW
WYDZIAŁU FIZYKI UW



Strukturalne i statystyczne aspekty polimerowych i białkowych lass

Bartosz A. Greń^{1,2}, Paweł Dąbrowski-Tumański^{1,3}, Joanna I. Sułkowska^{1,3}

¹ Uniwersytet Warszawski, Centrum Nowych Technologii

² Uniwersytet Warszawski, Wydział Fizyki

³ Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii

Białka odgrywają kluczową rolę w funkcjonowaniu wszystkich znanych organizmów, pełniąc m.in. funkcje strukturalne, regulatorowe, sygnałowe oraz enzymatyczne. Zrozumienie relacji między strukturą białek a ich funkcją jest jednym z kluczowych zagadnień biofizyki białek i jest ważne z punktu widzenia projektowania nowych leków.

Dopiero niedawno zaczęto zwracać uwagę na aspekty topologiczne struktury białek. Jedną z interesujących topologii są lassa, które składają się z pętli i ogona (ogonów). Pętla powstaje przez utworzenie mostka siarczkowego w białku. Gdy ogon lassa przecina powierzchnię rozpiętą na powierzchni pętli mówimy o lasso nietrywialnym. Niewiele wiadomo na temat roli, jaką pełnią nietrywialne lassa w białkach, jednakże wiemy, że leptyna (hormon białkowy zmniejszający apetyt poprzez wiązanie z receptorem w podwzgórzu) posiada lasso nietrywialne, które lokalnie stabilizuje białko i zwiększa skuteczność przekazywania sygnału do receptora. Wiemy też, że ok. 18% wszystkich białek z mostkami siarczkowymi posiada nietrywialne lasso, niemniej jednak nie wiemy, czy ewolucja preferuje nietrywialne lassa, gdyż nie wiemy jakie jest prawdopodobieństwo występowania lass w polimerach. Jeśli jest mniejsze to dlaczego – jakie prawa fizyki determinują tę własność?

W celu charakteryzacji strukturalnej lass trywialnych i nietrywialnych wykonano symulacje gruboziarnistej dynamiki molekularnej opierając się na modelu C_{α} . Uwzględniono w nim oddziaływania krótkozasięgowe oraz harmoniczne oddziaływania między sąsiednimi pseudoatomami w łańcuchu. Zbadano również statystykę pojawiania się nietrywialnych lass w idealnych polimerach. Nietrywialność określono znajdując przekłucia ogonem minimalnej powierzchni rozpiętej na pętli lassa. Wyniki porównano z danymi biologicznymi z bazy LassoProt.