

„Zbadanie wpływu zatłoczonego środowiska na dynamikę proteazy wirusa HCV metodami modelowania molekularnego i symulacji komputerowych”

Opiekunka: dr hab. Joanna Trylska, prof. UW (CeNT UW)

joanna@cent.uw.edu.pl

tel. 22 55 43 683

Współopieką: dr Krystiana Krzyśko

Krystiana.Krzysko@fuw.edu.pl

tel. 22 55 32 234

Naturalnym środowiskiem funkcjonowania enzymów jest cytoplazma. Cytoplazma jest heterogenną zatłoczoną strukturą, w której oprócz wody i jonów znajdują się kwasy nukleinowe, białka, lipidy, metabolity, zajmujące nawet do 40% jej objętości. Tak zatłoczone środowisko wpływa na dynamikę konformacyjną enzymów, jak również na ich dyfuzję translacyjną i rotacyjną, co przekłada się na zmiany aktywności katalitycznej w porównaniu do warunków w standardowych buforach. Badania będą polegały na określeniu wpływu zatłoczonego środowiska na dynamikę proteazy NS3/4A wirusa zapalenia wątroby typu C (hepatitis C virus, HCV). Modelem środowiska będą cząsteczki Ficollu – jednego z polisacharydów służącego do symulowania zatłoczenia w eksperymentach laboratoryjnych. Zadaniem magistranta będzie opracowanie parametrów pola siłowego Ficollu, przeprowadzenie symulacji dynamiki molekularnej NS3/4A w obecności Ficollu oraz analiza i interpretacja wyników symulacji.