

STRESZCZENIE

Przewidywanie struktury białek oraz ich kompleksów przy użyciu gruboziarnistego pola siłowego UNRES z wykorzystaniem informacji z baz danych.

Mgr Agnieszka Sylwia Karczyńska

Celem mojej rozprawy doktorskiej było opracowanie i udoskonalenie narzędzi służących do przewidywania struktury białek oraz ich kompleksów przy użyciu gruboziarnistego pola siłowego UNRES z wykorzystaniem informacji z baz danych oraz wyników uzyskanych metodami eksperymentalnymi.

W trakcie mojej pracy badawczej brałam aktywnie udział w 11-tej oraz 12-tej edycji eksperymentu CASP (z ang. Critical Assessment of protein Structure Prediction), co pozwoliło mi określić zdolności predykcyjne pola siłowego UNRES, oraz ukazało słabości w metodologii przewidywania struktur białek z wykorzystaniem informacji z baz danych, które dzięki temu mogły być później udoskonalone.

Realizację założonego celu kontynuowałam poprzez optymalizację parametrów odpowiedzialnych za siłę nakładanych ograniczeń oraz sprawdziłam jak wprowadzone więzy wpływają na przebieg symulacji oraz jaki wpływ na wyniki symulacji ma jakość wykorzystywanych do tego modeli.

Kolejnym punktem w kierunku osiągnięcia założonego w niniejszej rozprawie celu, było opracowanie metody do przewidywania struktury białek z wykorzystaniem informacji otrzymanych z pomiarów eksperymentu niskokątowego rozpraszania promieniowania rentgenowskiego (SAXS) na cząsteczce. Eksperyment SAXS jest metodą do badania kształtu struktury białek występujących w środowisku wodnym więc stanowi bardzo pomocne narzędzie jako kryterium selekcji wyników, lub jako zawężenie przeszukiwanej przestrzeni konformacyjnej badanego białka.

Ostatnim etapem mojej pracy było uczestniczenie w tworzeniu serwera internetowego mającego na celu ułatwienie naukowcom z całego świata przeprowadzanie gruboziarnistych symulacji molekularnych struktur białkowych w polu siłowym UNRES. Serwer daje również możliwość użycia w symulacjach danych z eksperymentu SAXS.