

Zespoły konformacyjne α -Synukleiny oraz formowanie się węzłów przejściowych

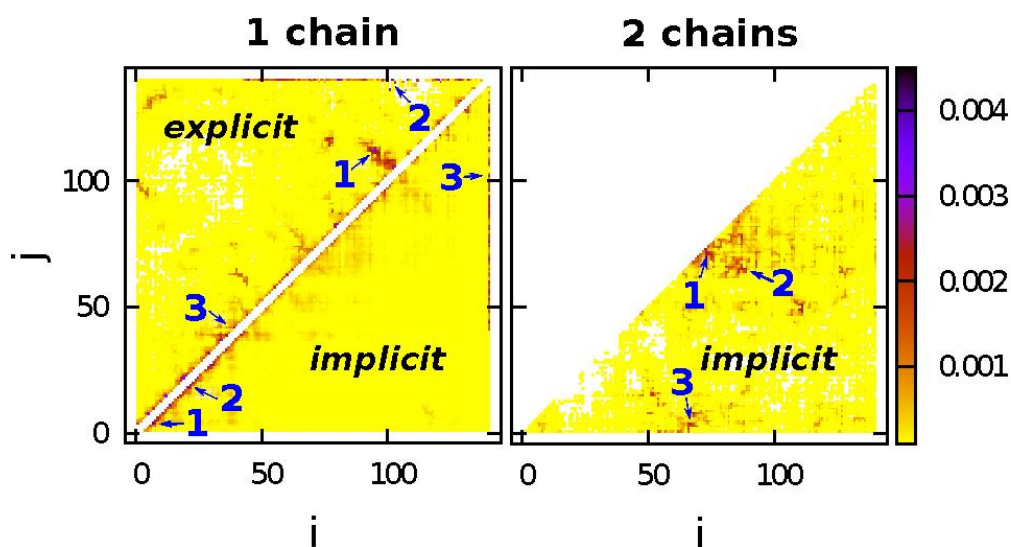
2020

1920

Mateusz Chwastyk, Marek Cieplak
Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie



Prezentowane wyniki przedstawiają efekty badań nad zespołami konformacyjnymi α -synukleiny za pomocą symulacji dynamiki molekularnej w ramach modelu pełnoatomowego z roztworem, jak i z roztworem efektywnym. Z każdą z konformacji związana jest częstotliwość tworzenia się określonego kontaktu. W obu podejściach symulowane białka, to białka nieuporządkowane o określonej sztywności łańcucha głównego. Struktury otrzymywane w ramach symulacji z rzeczywistym rozpuszczalnikiem wykazują istotnie większy zakres ruchów w stosunku do tych, uzyskiwanych z rozpuszczalnikiem efektywnym, co pozwala na tworzenie się przejściowych węzłów, zarówno głębokich, jak i płytkich, które mogą być zapętlone aż do 5 μ s. Pokazujemy ponadto, że agregacja dwóch łańcuchów zachodzi głównie przez tworzenie się kontaktów pomiędzy aminokwasami ze środkowej części łańcucha głównego. Obszar ten, ma tendencję do tworzenia helisy, gdy białko wiąże się z micelą.



Uśredniona po czasie mapa kontaktów tworzących się wewnątrz pojedynczego łańcucha w symulacjach z roztworem (explicit), jak i z roztworem efektywnym (implicit) oraz tworzących się pomiędzy dwoma łańcuchami w symulacjach z roztworem efektywnym. Kolory na wykresie oznaczają prawdopodobieństwo wystąpienia danego kontaktu. Białe obszary, to regiony w których kontakty nie zostały znalezione.

Literatura:

1. M. CHWASTYK, M. CIEPLAK, J. PHYS. CHEM. B 2020, 124, 1, 11-19

Słowa kluczowe: białka neurodegeneracyjne, węzły

