

Modellierung großer Strukturänderungen in Proteinen

Mykhaylo Berynskyy, Heidelberg

Abstract

In silico Methoden zur Modellierung von Proteinstrukturen und deren Dynamik werden dazu verwendet molekulare Mechanismen in der Zelle zu simulieren. Oft führen eine hohe Anzahl an Atomen oder grosse Strukturänderungen im Protein zu einem enormen Berechnungsaufwand.

Um grosse Strukturänderungen simulieren zu könnten werden im Rahmen dieser Arbeit neue Methoden entwickelt sowie vorhandene Methoden kombiniert. Eine Minimierung des Berechnungsaufwands wird dabei vorallem durch die Reduktion von Freiheitsgraden erreicht (sog. coarse-grained Modell). Als eine Applikation dieser Methode wurden strukturelle Änderungen im Protein Fasciculinesterase simuliert. Dieses Protein ist im Stande das Nervensystem zu parallelisieren. Weiterhin wurde die Dynamik des relativ grossen Proteins ClpB mittels einer Kombination von Methoden untersucht.