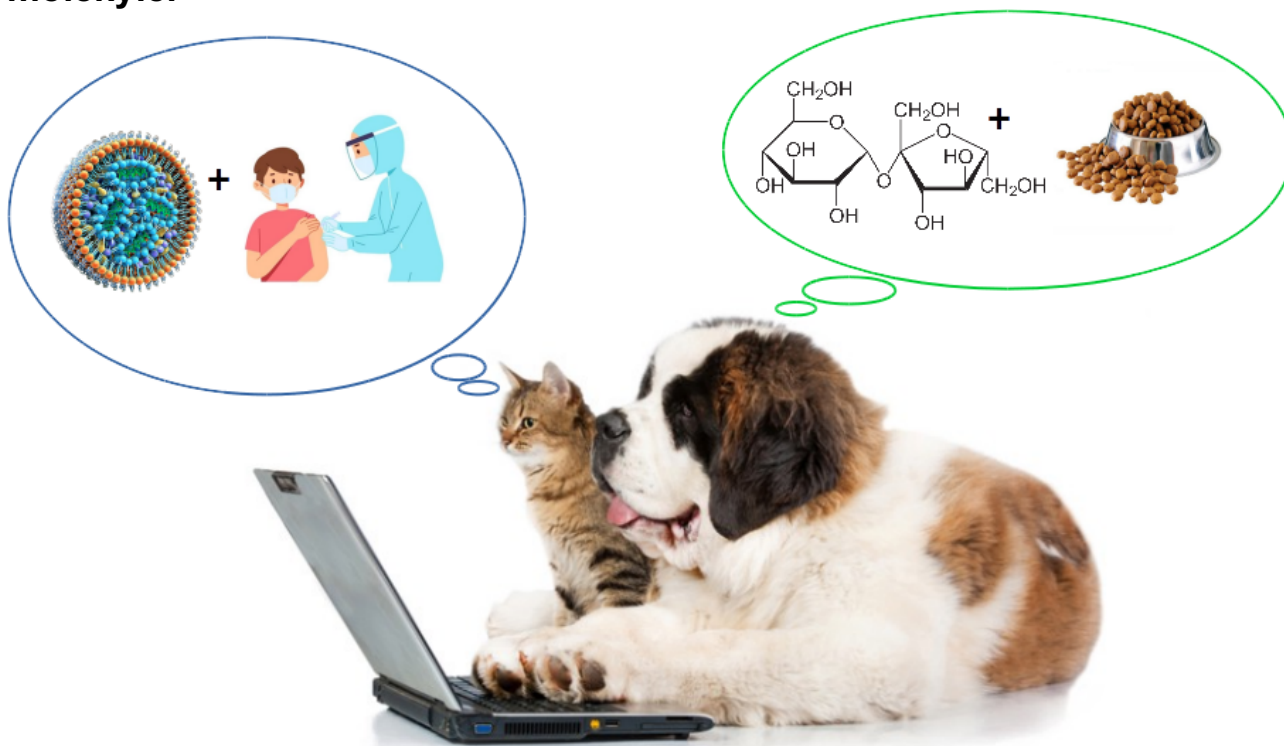


TIFX04-22-08

Simuleringar av interaktioner mellan socker och andra biologiska molekyler



Bakgrund: Socker finns i olika former i alla levande varelser. Beroende av koncentrationen av socker och förhållandet mellan mängderna av andra komponenter i djur eller människor kan sockermolekylerna bli antingen välgörande eller skadliga. Socker kan t.o.m. användas som stabiliseringsmedel för proteiner inom industrin, exempelvis som komponent i moderna mRNA-vaccin mot covid-19. I det här projektet ska ni studera interaktioner mellan socker och biologiska molekyler (proteiner, peptider, insulin, lipider, läkemedel, DNA, RNA) med hjälp av avancerade beräkningsmetoder som molekylodynamiksimuleringar. I samtliga studier ska ni undersöka både struktur och dynamik av blandningarna för att förstå vilka mekanismer som ligger bakom stabiliseringsegenskaperna av socker. Ni ska även dra slutsatser om vilken sockermolekyl som verkar mest lovande för industriella tillämpningar.

Problembeskrivning: Målet i det här arbete är att undersöka interaktioner mellan socker och andra biologiska molekyler.

Arbetsätt: För molekyler där kraftfältsp parametrar inte existerar ska ni först köra kvantkemiska beräkningar för att få fram kraftfältsp parametrar för dessa molekyler. När ni har tagit fram samtliga kraftfältsp parametrar som behövs ska ni köra molekylodynamiksimuleringar på systemen ni undersöker. Därefter ska ni utföra dataanalys och tolka resultaten. Litteratursökning och skrivandet av kandidatrapport ingår förstås också.

Gruppstorlek: Detta projekt är lämpligt för 1-3 grupper om 3-4 studenter.

Målgrupp: F, Kf, K, GU-fysik eller motsvarande.

Litteraturtips: Följande doktorsavhandlingar: Ermilova I. (2019) "Modeling of biomembranes: from computational toxicology to simulations of neurodegenerative diseases"; Olsson C. (2018) "The Role of Sugars for Protein Stabilization".

Handledare: Dr Inna Ermilova, Nano och biologisk fysik, inna.ermilova@chalmers.se, 0728487773.
Professor Jan Swenson, Nano och biologisk fysik, jan.swenson@chalmers.se, 031-772 5680.