

Streszczenie pracy doktorskiej:

Badanie atomowych modeli błony tylakoidu przy użyciu symulacji dynamiki molekularnej

Galaktolipidy występują w chloroplastach roślin zielonych, gdzie tworzą one zręb lipidowy błon tylakoidowych, w których zachodzi proces fotosyntezy. Najczęściej spotykanymi galaktolipidami w błonach fotosyntetyzujących są: monogalaktozylodiacylglicerol (MGDG) i digalaktozylodiacylglicerol (DGDG). Sumarycznie zawartość MGDG i DGDG w błonach tylakoidowych wynosi ok. 75%. Pomimo ogromnego znaczenia tych błon, ich badania modelowe, szczególnie te prowadzone metodami modelowania komputerowego, są nieliczne. Dotychczas ukazały się jedynie trzy prace stosujące symulacje dynamiki molekularnej z rozdzielczością atomową (MD) w badaniach błon zbudowanych z lipidów z głowami cukrowymi, w tym jedna poświęcona mieszaninie galaktolipidów i fosfatydylocholin. Metoda symulacji MD okazała się szczególnie cenna w badaniach modeli błon zwierzęcych i bakteryjnych, przede wszystkim ze względu na swoją rozdzielczość przestrzenną i czasową. Umożliwiła, jako metoda komplementarna do badań eksperymentalnych, wyjaśnienie podstawowych mechanizmów odpowiedzialnych za wiele zjawisk biofizycznych zachodzących na poziomie molekularnym w tych błonach.

Badania w tej pracy doktorskiej prowadzone były metodami symulacji MD. Zbudowano pięć modeli komputerowych uwodnionych dwuwastw w fazie lamelarniej złożonych albo jedynie z MGDG lub DGDG, albo z ich mieszaniny. Jeden układ został zbudowany z cząsteczek MGDG w odwróconej fazie heksagonalnej (H_{II}). Przeprowadzono 200-ns symulacje MD układów modelowych w dwóch temperaturach: 295 i 310 K ze względu na szeroki zakres temperatur, w których dochodzi do utworzenia fazy H_{II} .

Głównym celem tej pracy było scharakteryzowanie układów lamelarnych zbudowanych z galaktolipidów, poprzedzone walidacją poprawności zastosowanego modelu, oraz zbadanie wpływu MGDG na destabilizację układów mieszanych. Wyznaczono wielkości charakteryzujące układy, które są wyznaczane zarówno eksperymentalnie jak i w symulacjach i które można wykorzystać do walidacji modeli komputerowych. Były to: średnie pole powierzchni przypadające na lipid, elektronowy profil gęstości wzdłuż normalnej do błony, profil molekularnego parametru uporządkowania wzdłuż łańcucha, orientacja łańcuchów acylowych, orientacja oraz stopień hydratacji głów polarnych. Dla reprezentatywnych układów modelowych zbadano szczegółowo strukturę interfazy poprzez zastosowanie teorii grafów do opisu i analizy oddziaływań międzycząsteczkowych.

Dane eksperymentalne wskazują, że obecność MGDG w błonie fotosyntetycznej jest niezbędna dla właściwego funkcjonowania niektórych białek błonowych. MGDG jest lipidem promującym tworzenie się faz nielamelarnych, przede wszystkim H_{II} , można więc przypuszczać, że aktywność tych białek wymaga lokalnego otoczenia błonowego w tej fazie lub w jej pobliżu. Ważnym celem pracy doktorskiej było zbadanie, czy w pełni uwodnionej, lamelarniej błonie zawierającej MGDG w różnych stężeniach, proces tworzenia się fazy nielamelarnej zachodzi spontanicznie w wybranych temperaturach (295 i 310 K) i uwodnieniu (30H₂O/lipid). W trakcie 200-ns symulacji MD nie stwierdzono destabilizacji układów i przejścia do fazy H_{II} . Formowanie się odwróconej H_{II} jest procesem długotrwałym w skali czasowej pokrywanej przez pełnoatomowe symulacje MD, dlatego dodatkowo badano stabilność układu zbudowanego w fazie H_{II} . Wykazano, że układ ten jest stabilny w 200-ns symulacji MD. Wyznaczono jego parametry strukturalne: odległość międzypłaszczyznową oraz promień kanału wodnego.