

**Tematy prac licencjackich dla studentów specjalności “Projektowanie molekularne i bioinformatyka” na kierunku
“Zastosowanie fizyki w biologii i medycynie”
w roku akademickim 2012/2013**

1. „Enzymy ubikwitynujące i deubikwitynujące – ich rola w procesach nowotworowych i analiza porównawcza istniejących struktur”

opiekun dr Krystiana A. Krzyśko, 554 07 94, krzysko@bioexploratorium.pl

Procesy ubikwitynacji są elementem *recycling*’u białek w organizmach żywych. Za opis tych procesów w roku 2004 Aaron Ciechanover, Avram Herszko, Irwin Rose otrzymali Nagrodę Nobla. Okazuje się, że wadliwe funkcjonowanie procesu ubikwitynacji, jak i odwrotnego procesu, może mieć istotne znaczenie z punktu widzenia genezy procesów nowotworowych. Celem pracy jest dokonanie krytycznego przeglądu istniejącej literatury na ten temat, w miarę możliwości porównanie sekwencji oraz struktur ubikwitynaz i deubikwitynaz w istniejących bazach danych oraz wyciągnięcie wniosków z uzyskanych danych.

2. „Zastosowanie metod teoretycznych do modelowania kompleksów białko-ligand”

opiekun dr Krystiana A. Krzyśko, 554 07 94, krzysko@bioexploratorium.pl

Dokowanie to metoda modelowania molekularnego, pozwalająca na znalezienie położenia (i konformacji) ligandu w miejscu wiążącym receptora. Celem pracy jest dokonanie przeglądu programów do dokowania ligandów oraz wykonanie testowych obliczeń z zastosowaniem wybranych programów dla kompleksu receptor - ligand. W wyniku tych obliczeń oczekujemy odpowiedzi na pytanie czy na podstawie analizy oceny dokowania (robionej przez program) jesteśmy w stanie stwierdzić czy dokowany ligand jest agonistą czy antagonistą danego receptora. Do tego celu wykorzystane zostanie komercyjne oprogramowanie dostępne w pracowni, jak również darmowe oprogramowanie. Praca byłaby realizowana we współpracy z dr Michałem Kolińskim z Pracowni Biomodelowania Instytutu Medycyny Doświadczalnej i Klinicznej im. M. Mossakowskiego PAN

3. „Receptor EGFR – analiza i dokowanie przesiewowe”

opiekun dr Krystiana A. Krzyśko, 554 07 94, krzysko@bioexploratorium.pl

Jednym z molekularnych celów leczenia raka jest zahamowanie czynności receptora naskórkowego czynnika wzrostu (EGFR). Celem pracy jest zadokowanie znanych izoflawonoidów i związków o właściwościach antyrakowych, oraz porównanie ich sposobu wiązania ze znanymi inhibitorami receptora EGFR (dostępnymi w bazie danych PDB). Na podstawie tej analizy oczekujemy wskazania związków, które najlepiej są dopasowane do miejsca wiązania w receptorze EGFR i wykazują właściwości inhibujące podobne do znanych inhibitorów EGFR.

4. „Metody porównywania struktur przestrzennych RNA”

opiekun dr Paweł Daniluk, 554 07 76, pawel@bioexploratorium.pl

Celem pracy jest wykonanie przeglądu dostępnych publicznie metod porównywania struktur przestrzennych molekuł RNA. Badane metody zostaną przetestowane w celu oceny łatwości ich użycia i sprawdzenia zgodności ich działania z opisem podanym przez autorów. Jeżeli to okaże się możliwe, zostanie wyselekcjonowany zestaw przykładów, na których zostanie porównana jakość działania.

5. „Metody porównywania wielu struktur białek – przegląd literaturowy wykonanie testowych badań”

opiekun dr Paweł Daniluk, 554 07 76, pawel@bioexploratorium.pl

Celem pracy jest próba usystematyzowania znanych w literaturze metod obliczania multi-uliniowień struktur białek. Opracowanie będzie zawierało krótkie opisy badanych metod uwzględniające między innymi rodzaj obliczanych uliniowień, ograniczenia na liczbę i rozmiar struktur, zastosowany algorytm. Szczególny nacisk zostanie położony na metody oparte na algorytmach z zakresu sztucznej inteligencji, uczenia maszynowego oraz stosujące uciąglenia dyskretnych problemów optymalizacyjnych. Wybrane metody zostaną również przetestowane na wzorcowym zbiorze multi-uliniowień strukturalnych.

6. Symulacje szlaków sygnałowych i metabolicznych – przegląd literaturowy z uwzględnieniem analizy popularnych środowisk symulacyjnych.

Opiekun: prof. dr hab. Bogdan Lesyng, 554 08 09, lesyng@icm.edu.pl

Symulacje szlaków sygnałowych i metabolicznych stają się coraz bardziej popularne w badaniach złożonych procesów komórkowych, m.in. w celu lepszego zrozumienia programowanych mechanizmów śmierci komórki, procesów immunologicznych lub patologicznych procesów nowotworowych. Celem pracy jest dokonanie przeglądu literaturowego badań naukowych w tej dziedzinie, ze szczególnym uwzględnieniem analizy wykorzystywanych środowisk symulacyjnych.

7. Symulacja w środowisku Taverna wybranego procesu sygnałowego związanego z genezą procesu nowotworowego.

Opiekun: prof. dr hab. Bogdan Lesyng, 554 08 09, lesyng@icm.edu.pl

Symulacje szlaków sygnałowych i metabolicznych stają się coraz bardziej popularne w badaniach złożonych procesów komórkowych, m.in. w celu lepszego zrozumienia programowanych mechanizmów śmierci komórki, procesów immunologicznych lub patologicznych procesów nowotworowych. Celem pracy jest wykonanie symulacji fragmentu komórkowego procesu sygnałowego związanego z genezą wybranego procesu nowotworowego. Do tego celu wykorzystane zostanie środowisko symulacji procesów sygnałowych i metabolicznych – Taverna. Praca zostałaaby zrealizowana we współpracy z zespołem prof. Anny Gambin z Instytutu Informatyki MIMUW.

8. Analiza przyczynowości w zastosowaniu do dynamiki procesów bimolekularnych – przegląd literaturowy i wykonanie modelowych symulacji

Opiekun: prof. dr hab. Bogdan Lesyng, 554 08 09, lesyng@icm.edu.pl

Analiza przyczynowości zastosowana do dynamiki złożonych układów pozwala na detekcję i opis relacji przyczynowości łączących procesy składające się na dynamikę całego układu. Za rozwinięcie metodologii analizy przyczynowości w roku 2003 Granger (fizyk z wykształcenia) dostał nagrodę Nobla w dziedzinie ekonomii. Analiza przyczynowości jest też bardzo popularna w badaniach potencjałów czynnościowych EEG i staje się popularna w badaniach dynamiki układów biomolekularnych. Celem pracy jest przegląd literaturowy ostatnich osiągnięć naukowych w tej dziedzinie oraz wykonanie testowych obliczeń dla wybranego układu (bio)molekularnego z wykorzystaniem oprogramowania dostępnego w

pracowni. Praca byłaby realizowana we współpracy z dr Franciszkiem Rakowskim z ICM UW

.

9. Transfer protonów w układach biologicznych – przegląd literaturowy i wykonanie modelowych symulacji

Opiekun: prof. dr hab. Bogdan Lesyng, 554 08 09, lesyng@icm.edu.pl

Kwantowy transfer protonów („kwantowy hopping”) towarzyszy wielu procesom biomolekularnym. Celem pracy jest dokonanie przeglądu literaturowego ostatnich osiągnięć naukowych w formalnym opisie procesów tego typu oraz wykonanie testowych obliczeń z zastosowaniem wybranej metody dla prostego, modelowego molekularnego układu. Do tego celu wykorzystane zostanie oprogramowanie dostępne w pracowni. Praca byłaby realizowana we współpracy z dr Łukaszem Walewskim z Zakładu Chemii Teoretycznej Uniwersytetu w Bochum