



Contribution ID: 107

Type: Wystąpienie ustne // Talk

Hydrodynamika makrocząsteczek: wpływ struktury na właściwości transportowe białek i DNA

Tuesday, 9 September 2025 12:10 (20 minutes)

Wystąpienie poświęcone będzie wpływowi struktury makrocząsteczek na ich właściwości hydrodynamiczne, ze szczególnym uwzględnieniem białek nieuporządkowanych strukturalnie (IDP) oraz superskręconych minipętli DNA. Wyniki pokazują, że gruboziarniste modelowanie struktury molekularnej pozwala na precyzyjne przewidywanie takich parametrów jak współczynnik dyfuzji, sedimentacji czy promień hydrodynamiczny. W przypadku IDP opracowano efektywną metodę wyznaczania promienia hydrodynamicznego, bazującą na szybkim generowaniu zespołu konformacji za pomocą samounikających błędów losowych oraz zastosowaniu metody minimalnej dyssypacji energii [1]. Podejście to zostało zweryfikowane eksperymentalnie dla szerokiej gamy IDP o różnych długościach łańcucha i różnym składzie domenowym, wykazując znacznie większą dokładność niż klasyczne podejścia fenomenologiczne [2]. Wyniki badań pokazują, że uwzględnienie granic domen globularnych jest kluczowe dla dokładności predykcji, podczas wpływ oddziaływań między resztami aminokwasowymi w regionach nieuporządkowanych jest mniej znaczący. Z kolei w przypadku minipętli DNA wykazano, że ujemne superskręcenie znacząco wpływa na kształty pętli oraz ich właściwości hydrodynamiczne, mierzone metodą ultrawirowania analitycznego (AUC)[3]. Przewidywania teoretyczne, oparte na modelu włókna elastycznego i obliczeniach hydrodynamicznych, wykazały dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi, dostarczając cennych informacji o związku między kształtem DNA a jego zachowaniem hydrodynamicznym. Porównanie z metodami elektroforezy żelowej podkreśla zalety AUC w precyzyjnym badaniu właściwości transportowych, przy jednoczesnej konieczności wsparcia modelowaniem dla pełnej interpretacji danych.

[1] B. Cichocki, M. Rubin, A. Niedźwiecka, P. Szymczak, Diffusion coefficients of elastic macromolecules, *J. Fluid. Mech.*, 878, R3, 2019

[2] R. Waszkiewicz, A. Michaś, M.K. Białobrzewski, B. P. Klepka, M.K. Cieplak-Rotowska, Z. Staszalek, B. Cichocki, M. Lisicki, P. Szymczak, A. Niedźwiecka, Hydrodynamic Radii of Intrinsically Disordered Proteins: Fast Prediction by Minimum Dissipation Approximation and Experimental Validation, *J. Phys. Chem. Lett.*, 15, 5024-5033, 2024

[3] R. Waszkiewicz, M. Ranasinghe, J.M. Fogg, D. J. Catanese, M.L. Ekiel-Jezewska, M. Lisicki, B. Demeler, L. Zechiedrich, and P. Szymczak, DNA supercoiling-induced shapes alter minicircle hydrodynamic properties, *Nucleic Acids Res.* 51, 4027, 2023

Primary author: SZYMCZAK, Piotr

Presenter: SZYMCZAK, Piotr

Session Classification: Biofizyka

Track Classification: Biofizyka // Biophysics