

Der Lehrstuhl für technische Dynamik (LTD) der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg vergibt ab sofort eine

Masterarbeit zum Thema

Molekulardynamik und kinematisches Sampling: Validierung von Molekülkonfigurationen und Bewegungen

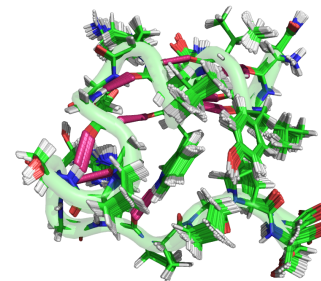
Molekulardynamik (MD) Simulationen sind das Maß der Dinge zur akkuraten Berechnung und Untersuchung der Dynamik von Proteinen. Dabei werden die Bewegungsgleichungen anhand ausgereifter Kraftfelder aufgestellt und numerisch bei kleinsten Zeitschritten integriert. So können sehr gute Vorhersagen bezüglich Proteinfaltung, konformativer Veränderungen, Stabilität des nativen Zustands, oder Interaktion mit Bindungspartnern gemacht werden. Die enormen Fortschritte bei Hard- und Software in den letzten Jahren haben zeitliche und räumliche Grenzen der Anwendbarkeit von MD weit ausgebaut. Dennoch bleibt der numerische Aufwand enorm und Einschränkungen bei der Untersuchung sehr großer Moleküle, sehr langsamen Prozessen mit hohen Energiebarrieren, sowie Ungenauigkeiten bei den Kraftfeldern oder Dateninterpretation bleiben bestehen. Dies führte zur Entwicklung erfolgreicher Methoden wie gesteuerte MD oder kinematisches Sampling. Diese Methoden haben einen geringeren Aufwand, jedoch müssen Ergebnisse genau inspiziert und validiert werden.

Diese Arbeit soll die Validierung für Kino-Geometric Sampling (KGS) im Vergleich mit traditioneller MD durchführen. KGS beschreibt Moleküle als kinematischen Graphen mit Torsionsfreiheitsgraden atomarer Bindungen, deren Bewegungen durch Zwangsbedingungen wie Wasserstoffbrücken und sterische Abstoßung eingeschränkt werden. Das Ziel ist es, zu untersuchen, inwiefern dieses vereinfachte Modell akkurate konformative Bewegungen reproduzieren kann. KGS könnte bei aufwändigen Systemen hilfreiche Startkonfigurationen für detaillierte, verkürzte MD Simulationen liefern, und so den numerischen Aufwand deutlich reduzieren.

Die Arbeit stützt sich auf existierende Software Pakete (Gromacs für MD, und KGS) und beinhaltet die Themen Datenvorbereitung, Anwendung der Software, sowie Auswertung anhand vorhandener und selbstprogrammierter Skripte. Die Arbeit wird gemeinsam ausgeschrieben von Prof. Dr. Sigrid Leyendecker am Lehrstuhl für Technische Dynamik und Prof. Dr. Rainer Böckmann am Lehrstuhl für Computational Biology. Sie kann in Deutsch oder Englisch verfasst werden.

Notwendige Qualifikation

- Vorlesung über Dynamik starrer Körper (oder vergleichbare Kenntnisse)
- Programmiererfahrung (Unix, Shell, C++, Python, R, ...)
- Interesse an Mechanik und Computational Biology / Biochemie



KGS Ensemble des Trp-Cage Miniprotein Construct TC5b (PDB ID 1l2y).

Bei Interesse wenden Sie sich bitte an Dominik Budday, per E-Mail unter dominik.budday@fau.de.