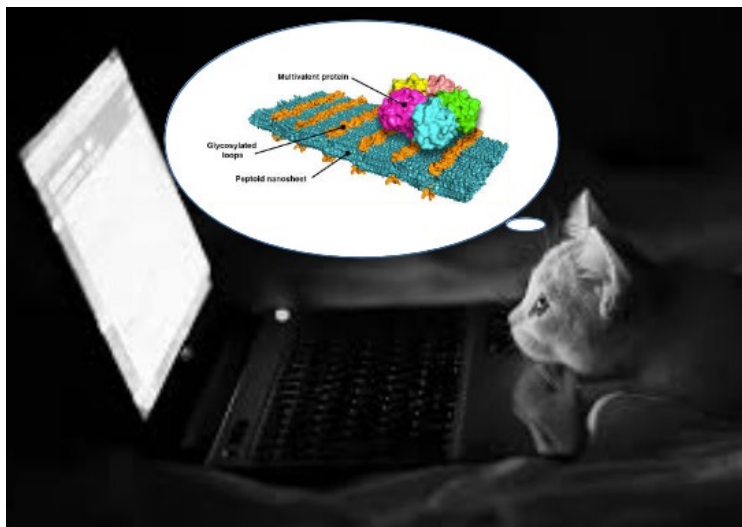


# Simuleringar av interaktioner mellan socker och andra biologiska molekyler

**Bakgrund:** Socker finns i olika former i alla levande varelser. Beroende på koncentrationen av socker och förhållandet till mängderna av andra komponenter i djur eller människor kan sockret vara antingen välgörande eller skadligt. Socker kan också användas som stabiliseringsmedel för proteiner inom industrin. Det är därför viktigt att förstå hur sockret lyckas stabilisera proteinerna. Socker spelar också en viktig roll för hur cellmembran och lipider beter sig, så studier av deras interaktioner kan leda till en ökad förståelse av underliggande mekanismer.



**Problembeskrivning:** Målet i det här arbete är att undersöka interaktioner mellan socker och andra molekyler genom molekuldynamik (MD) simuleringar för att förstå hur socker påverkar biologiska molekyler som proteiner, lipider, läkemedel, DNA och RNA. Forskningen kan leda till förbättrade läkemedel för olika sjukdomar.

**Arbetsätt:** För vissas typer av "nya" molekyler saknas kraftfältsp parametrar, och för sådana molekyler ska ni utföra kvantkemiska beräkningar för att få fram realistiska kraftfält till MD simuleringarna. Molekyler med existerande kraftfältsp parametrar kommer användas med dessa parametrar i MD simuleringarna. Ni ska sedan analysera resultaten från MD simuleringarna, göra litteratursökning och skriva kandidatrapporten.

**Gruppstorlek:** Detta projekt är lämpligt för en eller två grupper om 3-4 studenter.

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

**Litteraturtips:** Doktorsavhandlingarna Inna Ermilova "Modeling of biomembranes: from computational toxicology to simulations of neurodegenerative diseases" samt Christoffer Olsson "The Role of Sugars for Protein Stabilization".

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