Projecte de Treball Fi de Màster (TFM)

Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica
UB/UPC

Títol	**Simulació per dinàmica Browniana de la difusió macromolecular en medis intracel·lulars**
Title	**Brownian Dynamics simulation of macromolecule diffusion in intracellular media**

Director	**Sergio Madurga Díez**
Departament	**Química Física**
Universitat	**Universitat de Barcelona**
Tutor[1]	

Curs	**2015-16**

Summary[2]

This work will be focused on the application and development of Brownian dynamics simulations to study protein diffusion in crowded media (high concentration of particles) that mimics the intracellular environment. The cellular cytosol is a very dense medium, with huge concentrations of biological macromolecules that, by means of non-specific interactions, has considerable effect in diffusional properties.

In this work, a code will be developed to simulate the particle movement in mixtures of macromolecules of different sizes. The stochastic movement of particles will be generated by a Brownian motion algorithm. Soft potentials will be introduced to model macromolecular interactions. The space-time evolution analysis of the system will allow the calculation of the diffusional properties of specific proteins.

Keywords[3]	Brownian dynamics, crowded media, diffusion

Breu descripció del projecte[4]

Aquest TFM es basa en l'aplicació i desenvolupament de codis de simulació de dinàmica Browniana per estudiar la difusió proteica en medis crowded o aglomerats (alta concentració de partícules) que mimetitzen l'interior cel·lular. El citosol és un medi molt dens de partícules, amb alta concentració de macromolècules que mitjançant interaccions no específiques infereix un efecte sobre les propietats difusionals de les macromolècules.

En aquest treball, en primer lloc s'utilitzarà un programa lliure de dinàmica browniana[1] per tal d'estudiar alguns sistemes senzills, per posteriorment desenvolupar un codi propi aplicable a condicions més realistes que simulin l'interior cel·lular. El programa a desenvolupar permetrà analitzar quantitativament l'efecte de la reducció del coeficient de difusió en medis crowded respecte a l'obtingut en dissolució diluïda, i, permetrà quantificar el procés de difusió anòmal, el qual implica una difusió depenent del temps. Aquestes simulacions, off-lattice, permetran analitzar de forma més acurada i realista els sistemes estudiats prèviament amb tècniques Monte Carlo on-lattice [2,3].

[1] J. Schonebert, F. Noé PLoS ONE, 2013, 8, e74261.
[2] E. Vilaseca, A. Isvoran, S. Madurga, I. Pastor, J.L. Garcés, F. Mas. *PhysChemChemPhys*, 2011, **13**, 7396-7407.
[3] E. Vilaseca, I. Pastor, A. Isvoran, S. Madurga, J.L. Garcés, F. Mas. *Theor. Chem. Acc.,* 2011, **128**, 795-805.

Competències addicionals[5] (opcional)

Tasques a desenvolupar[6]		**Cronograma** (setmanes)																	
Tasca	**Descripció**	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18
T01	**Bibliografia (aprox. 50 h)**	X	X	X	X					X	X	X	X						
T02	**Càlculs amb ReaDDy (aprox. 75h)**			X	X	X	X												
T03	**Desenvolupament codi dinàmica browniana (aprox. 100h)**							X	X	X	X	X							
T04	**Càlculs difusió en medis crowded homogenis (aprox. 60h)**										X	X	X	X					
T05	**Càlculs difusió en medis crowded heterogenis (aprox. 40h)**													X	X	X			
T06	**Redacció de la memòria i preparar l'exposició (aprox. 100h)**														X	X	X	X	X
T07																			
T08																			
T09																			
T10																			

Observacions i comentaris
Per a la realització del treball pròpiament dit es preveu una dedicació d'unes quatre hores diàries durant cinc dies a la setmana, amb l'opció de modificació de l'horari per poder adaptar-se millor a l'horari acadèmic de l'estudiant.

Signatura (el director del TFM)

Signatura (el tutor del TFM, si s'escau)