

**Baltymų sąveikų analizė ir prognozavimas kompiuteriniais metodais**  
*Computational analysis and prediction of protein interactions*

**Aprašymas:** Baltymai paprastai suformuoja specifines erdvines (3D) struktūras, kurios ir apsprendžia baltymo molekulinę funkciją. Pastaruoju metu aiškėja, kad dauguma baltymų funkcionuoja ne kaip pavienės molekulės, o sąveikaudami tarpusavyje, tai yra, sudarydami stabilius arba laikinus kompleksus. Tokie kompleksai gali būti sudaryti arba iš to paties baltymo kopijų (homomerai), arba iš skirtingų baltymų (heteromerai). Norint suprasti ir/ar keisti baltymų funkciją, reikia žinoti jų sudaromų kompleksų struktūras. Deja, baltymų kompleksų struktūrų yra išspręsta palyginti mažai, nes tai yra brangu, ilgai užtrunka ir ne visada pavyksta. Kompiuterinių (bioinformatikos) metodų panaudojimas potencialiai gali šią situaciją žymiai pagerinti. Paskutiniu metu, pritaikius dirbtinio intelekto metodus, itin patobulėjo individualių baltymų struktūros prognozavimas. Tačiau baltymų kompleksų modeliavimo srityje panašus proveržis kol kas neįvyko. Iš dalies tai susiję su tuo, kad nėra iki galo aišku, kas nulemia baltymų sąveikas ir jų stabilumą. Šio doktorantūros projekto metu baltymų sąveikos bus tiriamos erdvinių struktūrų kontekste, siekiant nustatyti, kas būdinga baltymų sąveikos paviršiams, kuo jie skiriasi nuo nesąveikaujančių paviršių ir kaip atskirti vienus nuo kitų. Gautos žinios bus panaudotos baltymų sąveikų paviršiams bei kompleksų struktūroms prognozuoti. Šiems tikslams pasiekti bus naudojami įvairūs naujausi kompiuteriniai metodai bei baltymų struktūrų ir sekų duomenys.

Doktorantūros projektas skirtas molekulinės biologijos, biochemijos, biofizikos ar bioinformatikos studijas baigusiems pretendentams.

**Abstract:**

Proteins typically fold into specific three-dimensional (3D) structures that define their molecular function. As it turns out, most proteins function not as isolated molecules but as components of either stable or transient complexes. Such complexes may be composed of copies of the same protein (homomers) or different proteins (heteromers). For comprehensive understanding and/or modification of protein function one has to know the 3D structure of corresponding protein complex. Unfortunately, the number of solved structures of protein complexes is relatively small, because experimental methods are slow, expensive and not always successful. Computational approaches have the potential to make a significant contribution to solving this problem. Recently, artificial intelligence contributed to a breakthrough in predicting structures of monomeric proteins. However, this has yet to occur in predicting 3D structures of protein complexes. In part the problem is that the structural features determining protein interactions and their stability are still poorly understood. The overall goal of this Ph.D. project is to explore properties of protein interaction interfaces, to understand what makes them different from other regions of protein surfaces and how to distinguish between the two. This will be achieved through comprehensive analyses of structurally-resolved protein interactions. The derived knowledge will be utilized to improve prediction of structures of protein complexes and protein binding sites. The project will be implemented using cutting-edge computational methods as well as protein structure and sequence data.

Applicants are expected to have their training background in molecular biology, biochemistry, biophysics or bioinformatics.

**Mokslinis vadovas / supervisor:**

dr. Česlovas Venclovas; Biotechnologijos institutas, GMC, VU / Institute of Biotechnology,  
Life Sciences Center, Vilnius University

**Konsultantai / Consultants:**

dr. Justas Dapkūnas, dr. Kliment Olechnovič

**Kontaktai / Contacts:**

El. p. / Email: ceslovas.venclovas@bti.vu.lt

Tel. / phone: +370-5-223-4368