

nodigt U graag uit op de openbare verdediging van het proefschrift van

Bhawna Dixit

ter behaling van de graad van Doctor in de bio-ingenieurswetenschappen

Gezamenlijk doctoraat met UGent

Onderzoek naar de flexibiliteit van eiwitten met behulp van moleculaire-dynamicsimulaties van α -1-acid-glycoproteïne en grootschalige normale-modes-analyse van AlphaFold-modellen

Dinsdag **25 februari 2025** om **14u30**

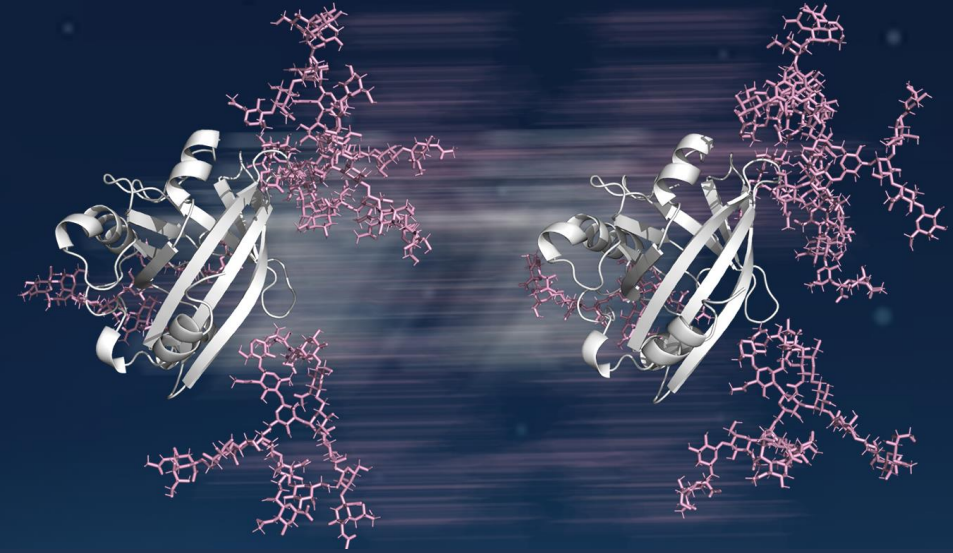
Auditorium P Jozef Plateau, , gelijkvloers, Jozef Plateaustraat 22, 9000 Gent

De verdediging kan via een livestream gevolgd worden: : [MSTeams](#)

Na de verdediging bent u van harte welkom op de **receptie om 17:00 uur**.

Gelieve uw aanwezigheid vóór **18 februari** te bevestigen via e-mail
bhawna.dixit@ugent.be, or bhawna.dixit@vub.be of via [google forms](#)

Met vriendelijke groet, Bhawna Dixit



Samenstelling van de jury

Prof. Dr. ir. Joris Degroote, Ghent University, Belgium (chair)
Prof. Dr. Dominique Maes, Vrije Universiteit Brussel, Belgium
Prof. Dr. Janez Konc, National Institute of Chemistry, Slovenia
Prof. Dr. Savvas Savvides, Ghent University, Belgium
Prof. Dr. Kathleen Marchal, Ghent University, Belgium
Prof. Dr. Karine Breckpot, Vrije Universiteit Brussel, Belgium
Prof. Dr. Vera Van Noort, KU Leuven, Belgium

Promotoren

Prof. Dr. ir. An Ghysels, Ghent University, Belgium
Prof. Dr. Wim Vranken, Vrije Universiteit Brussel, Belgium

Onderzoek naar de flexibiliteit van eiwitten met behulp van moleculaire-dynamicasimulaties van α -1-acid-glycoproteïne en grootschalige normale-modes-analyse van AlphaFold-modellen

Samenvatting

Eiwitten zijn van nature dynamisch en vertonen conformationele flexibiliteit die essentieel is voor hun biologische functies. Deze flexibiliteit varieert van complete structurele wanorde tot meer gelimiteerde structurele veranderingen in eiwitfragmenten, waarbij diverse conformationele toestanden mogelijk zijn. Dit dynamisch gedrag wordt aangedreven door thermische beweging van atomen. Ondanks deze intrinsieke flexibiliteit worden eiwitten vaak weergegeven door statische modellen, die de werkelijke dynamiek niet vastleggen. Dit proefschrift onderzoekt de flexibiliteit van eiwitten met twee complementaire benaderingen: een "close-up"-perspectief en een "panoramisch" perspectief.

Het close-up-perspectief richt zich op het α -1-acid-glycoproteïne (AGP) en zijn mutanten. Door middel van moleculaire dynamica simulaties (MD) wordt onderzocht hoe mutaties en glycosylering de conformationele dynamiek en flexibiliteit van AGP beïnvloeden en hoe dit verband houdt met zijn AGP's bij kanker. Het panoramische perspectief bekijkt een uitgebreide set van eiwitten en combineert computationele en experimentele methoden, waaronder AlphaFold2's pLDDT-scores, NMR-gegevens, MD-simulaties en Normal Mode Analyse (NMA), om de relatie tussen computationele voorspellingen en experimenteel waargenomen eiwitflexibiliteit te onderzoeken.

Deze benaderingen bieden een diepgaand inzicht in eiwitflexibiliteit en verbeteren ons begrip van het biofysische gedrag van eiwitten, met name in de context van glycosylering. De resultaten dragen bij aan het integreren van eiwitdynamiek in eiwitstructuurvoorspellingen.

Samenstelling van de jury

Prof. Dr. ir. Joris Degroote, Ghent University, Belgium (chair)

Prof. Dr. Dominique Maes, Vrije Universiteit Brussel, Belgium

Prof. Dr. Janez Konc, National Institute of Chemistry, Slovenia

Prof. Dr. Savvas Savvides, Ghent University, Belgium

Prof. Dr. Kathleen Marchal, Ghent University, Belgium

Prof. Dr. Karine Breckpot, Vrije Universiteit Brussel, Belgium

Prof. Dr. Vera Van Noort, KU Leuven, Belgium

Promotoren

Prof. Dr. ir. An Ghysels, Ghent University, Belgium

Prof. Dr. Wim Vranken, Vrije Universiteit Brussel, Belgium

