

## Dyfuzja białek w pobliżu modelowych błon biologicznych

Podstawowe jednostki życia, jakimi są komórki biologiczne, ograniczone są przez błony, które oddzielają ich wewnętrzne składniki od środowiska zewnętrznego. Błona komórkowa tworzy specyficzny kontener, który skrywa podstawowe funkcje komórki biologicznej. Asocjacja różnorodnych białek z wewnętrzną (cytoplazmatyczną) warstwą błony leży u podstaw znakomitej większości procesów komórkowych, od przekazywania sygnałów po transport (białek, patogenów i innych makromolekuł) z i do wnętrza komórki. Na powierzchni wewnętrznej warstwy błony komórkowej komórek eukariotycznych zgromadzony jest ujemny ładunek, co wynika z obecności anionowych lipidów. Wiązanie białek z cytoplazmy komórki na powierzchni błony często wspomagane jest oddziaływaniami z tymi lipidami. Wyniki badań, prowadzonych zarówno metodami teoretycznymi/obliczeniowymi jak i eksperymentalnymi, wskazują na centralną rolę oddziaływań elektrostatycznych w procesach asocjacji białek z powierzchniami błon. Kolejnym czynnikiem ważnym dla procesów asocjacji białko-błona jest geometryczne ograniczenie przestrzeni, wynikające z obecności błony, które powoduje anizotropię dyfuzji biomolekuł. Można się również spodziewać ogólnego spowolnienia ruchów brownowskich spowodowanego oddziaływaniami hydrodynamicznymi dyfundujących biomolekuł z otaczającą komórkę błoną. Wśród oddziaływań warunkujących dynamikę biomolekuł w wodnym rozpuszczalniku, szczególny typ stanowią oddziaływania hydrodynamiczne. Źródłem tych oddziaływań są przepływy indukowane przez molekuly poruszające się w lepkiem rozpuszczalniku, które modyfikują ruchy innych molekuł. Oddziaływania hydrodynamiczne modyfikują także ruch molekuł w obecności nieruchomych przeszkód i granic układu takich jak błony biologiczne. W odróżnieniu od oddziaływań potencjalnych (jak oddziaływania elektrostatyczne), te długozasięgowe oddziaływania propagowane przez rozpuszczalnik są obecne jedynie w przypadku poruszających się obiektów. Białka poszukują miejsc bezpośredniego wiązania na powierzchni błony (lub związanych z błoną receptorów białkowych) w drodze dyfuzji w trzech (w cytoplazmie) i dwóch (przy powierzchni błony) wymiarach i należy się spodziewać, że te poszukiwania (a zatem także kinetyka procesów asocjacji) podlegają wpływowi oddziaływań hydrodynamicznych. Projekt poświęcony jest problemowi dyfuzji białek w pobliżu powierzchni błon biologicznych. Celem naszych badań jest określenie, w jakim stopniu oddziaływania hydrodynamiczne z błonami biologicznymi modyfikują lokalną translacyjną i rotacyjną dyfuzję białek i jaka jest ewentualna rola tych oddziaływań w procesach asocjacji białek z błonami. Projekt ma naturę teoretyczną/obliczeniową. W badaniach wykorzystujemy obliczenia numeryczne i symulacje komputerowe modelowych układów białko-błona. Nasze badania mają znaczenie dla zrozumienia procesów żywych komórek, w których dochodzi do oddziaływań biomolekuł z błonami biologicznymi i związanymi z błonami biologicznymi receptorami. Ponadto, jako że efekty oddziaływań hydrodynamicznych są w przypadku układów biologicznych wciąż słabo poznane, a badania (zarówno obliczeniowe, jak i eksperymentalne) poświęcone oddziaływaniom hydrodynamicznym w takich układach są stosunkowo nieliczne, nasz projekt jest również ważny dla ogólnego zrozumienia podstawowych mechanizmów dyfuzji i procesów molekularnych w układach biologicznych.