

Każdy żywy system w każdej chwili swojego istnienia zawiera kilka tysięcy niskocząsteczkowych związków organicznych, zarówno endo- jak i egzogennych. Całość tych związków tworzy metabolom. Aby prawidłowo spełniać swoje funkcje, cząsteczki te muszą docierać do miejsc swojego działania, w większości zlokalizowanych na powierzchni lub we wnętrzu białek. Transport metabolomu w obrębie białek odbywa się głównie przez tunele i kanały. Łącząc wnętrze białka z jego powierzchnią, tunele transportowe umożliwiają wędrówkę ligandów pomiędzy różnymi regionami białka lub nawet w obrębie całej komórki, jak w przypadku białek błonowych. Bardzo precyzyjna regulacja transportu skutkuje możliwością symbiotycznego współistnienia wielu różnych związków chemicznych w obrębie jednego przedziału subkomórkowego (lub całej komórki), bez żadnych zakłóceń. W przypadku enzymów, tunele łączą ukryte w ich wnętrzu miejsce aktywne ze środowiskiem zewnętrznym, umożliwiając tym samym dostęp substratów oraz uwalnianie produktów reakcji. Przez tunele dostarczanych jest również wiele dodatkowych składników metabolomu, niezbędnych do prawidłowego funkcjonowania żywych organizmów.

Pomimo ich ogromnego znaczenia, tunele transportowe są często pomijane w badaniach nad funkcją białek, ze względu na ich przejściowy charakter, który znacznie utrudnia ich analizę i identyfikację w strukturze białka. Aby pokonać tę przeszkodę, tunele mogą być badane za pomocą bardzo skomplikowanych symulacji dynamiki molekularnej, które są wymagające obliczeniowo a ich przeprowadzanie wymaga dużej wiedzy i doświadczenia. W przedstawionym projekcie planujemy rozwinąć metodologię, która skutecznie i w sposób automatyczny przeprowadzi taką analizę. Nasza metoda umożliwi zbadanie funkcji transportowej białek nie tylko nam, ale i innym naukowcom. Jednocześnie, zastosujemy opracowane metody w celu zbadania białek istotnych dla ludzkiego zdrowia, a także tych, które są wykorzystywane w biotechnologii. Nasze badania zapewnią pełniejsze zrozumienie mechanizmów działania różnych białek w komórkach. Ponadto, znajomość tuneli może być wykorzystana w bioinżynierii białek, do produkcji białek o polepszonych biotechnologicznych właściwościach. Podobnie, inhibitory nacelowane na tunele enzymów biorących udział w różnych procesach chorobotwórczych, mogą stworzyć alternatywną drogę rozwoju nowych leków.