

Ten projekt powstał z mojej ciekawości, dlaczego procesy biologiczne zachodzą właśnie tak a nie inaczej, co określa szybkości tych procesów i czas życia układów biologicznych; jak modelować biologiczne, żyjące organizmy? Są to nadzwyczajnie złożone pytania i nie mam złudzeń, że przez wiele pokoleń odpowiedzi mogą nie zostać znalezione. Jednak nawet niewielki krok naprzód może spowodować znaczny przełom w naszej wiedzy i doprowadzić do rozwoju nowych zastosowań biotechnologicznych. Na przykład, opracowanie rzetelnych narzędzi komputerowych do modelowania procesów komórkowych może pomóc w zoptymalizowaniu *in vivo* metod w produkcji wielu ważnych enzymów i innych cząsteczek dla medycyny i biotechnologii, przy jednoczesnej oszczędności pieniędzy przedsiębiorców oraz podatników na kosztownych eksperymentach.

Ten projekt jest pierwszym krokiem w kierunku takiego modelowania, oraz próbą poszerzenia naszej wiedzy i lepszego zrozumienia dyfuzji w zatłoczonym środowisku wnętrza komórek biologicznych, które są podstawowymi elementami, 'atomami' wszystkich znanych form biologicznych na Ziemi. Moim głównym zainteresowaniem jest dyfuzja makrocząsteczek (takich jak białka, enzymy, itd.) w równowadze, ale również poza równowagą, ponieważ ostatnie eksperymenty wykazują, że dyfuzja wewnątrz aktywnych i nieaktywnych komórek może się znacznie różnić. Głównym celem tego projektu jest badanie zależności dyfuzji od wielkości i kształtu makrocząsteczek, oraz jak wpływają na dyfuzję podstawowe procesy metabolizmu komórek, takie jak strumienie metaboliczne i reakcje chemiczne.

Zwrócę również uwagę na metabolity, mniejsze cząsteczki (takie jak glukoza, sacharoza, witaminy, itd.), które są przekształcane w różnych drogach metabolicznych wewnątrz komórek. Dyfuzja tych cząsteczek została praktycznie zapomniana przez społeczność biofizyczną, ale jest kluczem do zrozumienia szybkości wielu procesów komórkowych. Ostatecznym celem jest przewidzenie właściwości transportowych metabolitów korzystając z symulacji komputerowych, i łączenie ich z modelowaniem wieloskalowym procesów reakcji i dyfuzji w środowisku komórkowym.

Badanie to będzie prowadzone głównie za pomocą symulacji komputerowych, ale planowana jest współpraca z moimi eksperymentalnymi kolegami. Jest to ważne w celu zweryfikowania stosowanych modeli i podejść, a jeszcze bardziej, aby ustalić solidne podstawy dla naszego zrozumienia dyfuzji jako punkt wyjścia do dalszych badań. Moje długoterminowe cele wykraczają daleko poza cele tego projektu. Mianowicie, mam na celu opracowanie modelu symulacyjnego całych komórek, uwzględniającego ich przestrzenną niejednorodność, który pomógłby nam odpowiedzieć na wiele ważnych zagadnień technologicznych i biofizycznych. Transport metaboliczny i dyfuzja makromolekularna są zasadniczymi składnikami takiego modelowania, a ich pełne zrozumienie ma zasadnicze znaczenie, bez którego postępy w tym kierunku nie będą możliwe.