

Popularnonaukowe streszczenie projektu

Pod hasłem *durotaksja* kryje się zlepek słów pochodzenia łacińskiego [łac. *duro* – wytrzymały] i greckiego [gr. *taxis* – rozmieszczenie], oznaczający reakcję ruchową swobodnie poruszających się komórek i niższych organizmów, zachodzącą pod wpływem różnic w twardości podłoża. Zazwyczaj komórki (np. ludzkie fibroblasty oraz komórki mięśni gładkich) przemieszczają się w kierunku podłoża o większej sztywności a wraz z jej wzrostem zdolność do migracji komórek maleje. To zachowanie żywej materii zainspirowało inżynierów materiałowych do badań nad substancjami, których krople mogą się poruszać bez udziału sił zewnętrznych takich jak ciepło, środki chemiczne czy elektryczność. Zewnętrzne źródła energii stopniowo niszczą podłoże, co ma negatywny wpływ na powtarzalność a tym samym na długofalową wydajność procesu i przekłada się bezpośrednio na koszt utrzymania takiego urządzenia. Zaledwie cztery lata temu przeprowadzone zostały pierwsze eksperymenty, w których zaobserwowano durotaksję płynnych kropli po podłożu o zmiennej twardości. Dostrzeżona wówczas różnica między kroplami a komórkami polegała na tym, że płyny wolały bardziej miękkie obszary podłoża, a komórki – te bardziej twarde. Wciąż jednak wiele kwestii związanych z mechanizmem durotaksji nie jest poznanych. Celem tego projektu jest wskazanie czynników determinujących samoistny ruch kropli (również tych imitujących komórki, zbudowanych z tzw. *aktywnej substancji*), po różnych podłożach przy użyciu najnowocześniejszych metod wieloskalowego modelowania komputerowego. Wybór metodologii podytkowany jest tym, że zaobserwowanie silnego wpływu subtelnych różnic fizykochemicznych kropli i podłoża na mechanizm i wydajność durotaksji wymaga rozdzielczości prowadzonych badań o wiele wyższej (w nanoskali) niż mogą zapewnić metody eksperymentalne stosowane w mikromechanice płynów (sięgające mikroskali). Proponowane symulacje komputerowe są gwarancją rzetelnej analizy parametrów wpływających na samoistny ruch nanoobiektów po podłożach o różnych właściwościach fizykochemicznych wynikających między innymi z odpowiedniego wzornictwa (np. falistość podłoża). Te wysoce precyzyjne badania *in silico* będą nie tylko dopełnieniem, ale też rozwinięciem obserwacji pochodzących z badań eksperymentalnych. Oczekiwany wynikiem projektu jest ugruntowanie (wciąż niedostatecznej) wiedzy na temat mechanizmów durotaksji oraz nowe wytyczne dla inżynierii materiałowej pozwalające zwiększyć wydajność urządzeń bazujących na tym zjawisku oraz na ich dalszą miniaturyzację. Badania i uzyskane wyniki mogą przyczynić się do rozwoju mikromechaniki płynów, produkcji w mikroskali, wytwarzania inteligentnych (samoczyszczących i samonaprawiających się) powłok oraz innych zastosowań wymagających kontroli przepływów, na przykład w medycynie regeneracyjnej. Durotaksja cieczy może również stanowić podstawę do otrzymywania wykorzystujących skuteczniejszą energię, systemów chłodzących.