

STRESZCZENIE

Bezpromienisty transfer energii zachodzi powszechnie w przyrodzie, na przykład w fotosyntezie lub procesie widzenia, jak również, ze względu na silną zależność wydajności transferu od odległości między molekułami, stanowi użyteczne narzędzie w fizyce molekularnej. Pomiar wydajności transferu mogą być traktowane jako swego rodzaju linijka spektroskopowa, pozwalająca ocenić odległość zarówno pomiędzy dwiema różnymi molekułami, jak i częściami tej samej makromolekuły. Umożliwia to monitorowanie przeróżnych procesów biologicznych, jak na przykład interakcji między białkami lub zmian konformacyjnych w obrębie białek i nici DNA. Szczególną rolę w tym ostatnim aspekcie odgrywa Försterowski rezonansowy transfer energii (FRET) który polega na spontanicznym przekazie energii wzbudzenia pomiędzy dwiema molekułami w wyniku oddziaływania typu dipol-dipol.

Pomimo powszechnego wykorzystywania tego rodzaju transferu w naukach biologicznych, interpretacja wyników pomiarów FRET wciąż przysparza wielu problemów, szczególnie jeżeli zależy nam na uzyskaniu szczegółowej, ilościowej informacji o odległościach pomiędzy molekułami. Jeden z nich wynika z dodatkowej zależności transferu od wzajemnej orientacji dipolowych momentów przejść molekuł, zdefiniowanej za pomocą czynnika orientacyjnego. Wielkość ta, w większości przypadków, nie jest mierzalna eksperymentalnie.

Kolejną trudność bierze się z faktu, że barwniki fluorescencyjne wykorzystywane w eksperymentach FRET zazwyczaj połączone są z makromolekułą za pomocą łącznika charakteryzującego się dużą swobodą konformacyjną. Przyczynia się to do tak zwanej dyfuzji barwników. Zjawisko to wprowadza dodatkową niepewność w wyznaczaniu odległości między molekułami. Kolejnym problemem jest ograniczony zasięg linijki spektroskopowej bazującej na zjawisku FRET. W standardowych eksperymentach górną granicą zastosowania rezonansowego transferu energii do pomiaru odległości jest 100 Å, co wyklucza zastosowanie tej metody w przypadku większych układów biologicznych. W niniejszej pracy, wykorzystując szerokie spektrum modeli numerycznych, odnoszę się do wymienionych powyżej problemów. Uzyskane w ten sposób narzędzia mogą być wykorzystywane do lepszej interpretacji wyników pomiarów FRET, jak również mogą mieć duży wpływ na planowanie eksperymentów.

Praca ta ma formę spójnego tematycznie zbioru artykułów opatrzonego komentarzem autorskim. Ze względu na złożoność zagadnień, oraz przez potrzebę uzyskania kompromisu pomiędzy wymogami prawa polskiego i australijskiego, komentarz ten jest bardzo obszerny. Zawiera, między innymi, dwa rozdziały opisujące plany dalszych badań w tej dziedzinie.