



Dr Tomasz Skóra

Rozmowa z autorem pracy: „Dyfuzja i reakcje w zatłoczeniu: Teoria i symulacje”

W którym momencie swojego życia postanowił Pan poświęcić swój czas nauce?

Szedłem na studia już z myślą o tym, żeby zostać naukowcem, choć nie rozumiałem wtedy, co to właściwie znaczy. Wynikało to z faktu, że od dziecka interesowały mnie nauki ścisłe, a najbardziej chemia. Dużą rolę odegrały w tym książki z kultowej serii „Monstrrrualna Erudycja”, a w szczególności „Chemiczny Chaos”. Nieco już sfatygowany egzemplarz wciąż zajmuje ważne miejsce w mojej książkowej kolekcji i regularnie do niego wracam.

Będąc już na studiach utwierdziłem się w moim planie, a studiując na Uniwersytecie Śląskim zaangażowałem się w działanie Koła Naukowego „Aqua Regia”. Na studia magisterskie przenieśliśmy się na Uniwersytet Jagielloński. W arkana pracy naukowej wprowadzał mnie tam prof. Petelenz, który wywarł największy wpływ na moje wyobrażenie pracy i etosu uczonego. Jednakże postanowiłem zmienić tematykę badawczą i przenieśliśmy się do Instytutu Chemii Fizycznej PAN, gdzie zacząłem od nowa w tematyce na pograniczu biologii, fizyki i chemii. Mój promotor, dr hab. Kondrat nauczył mnie wielu aspektów pracy badawczej i networkingu. Doktorat był momentami stresujący, ale przyniósł mi masę satysfakcji. Polecam go wszystkim, którzy cechują się dużą ciekawością świata oraz pokorą i cierpliwością, bo proces odkrywania bywa żmudny.

Czy wybór kierunku dalszego rozwoju był trudny?

Na wczesnym etapie studiów nie przywiązywałem się do konkretnego zagadnienia czy obszaru badawczego. Ostatecznie tematyka znalazła mnie – została wyznaczona przez grant, w ramach którego zostałem przyjęty na studia doktoranckie: dyfuzja w zatłoczonych środowiskach. Jest to jednak bardzo szeroko zarysowany temat, w związku z czym miałem niemalą swobodę w wyborze konkretnych zagadnień oraz metod badawczych.

Prosimy o krótkie zaprezentowanie o czym traktuje Pańska dysertacja.

Jednym z wielkich wyzwań XXI-wiecznej nauki jest zrozumienie działania komórek żywych w oparciu o ich części składowe (białka, DNA, RNA i inne). Do podstawowych czynności, jakie wykonują biocząsteczki, możemy zaliczyć poruszanie się w obrębie komórki oraz wchodzenie w reakcje chemiczne. Choć posiadamy już rozległą wiedzę o tych procesach poprzez izolowanie substancji biologicznych i ich badanie w kontrolowanych warunkach, coraz więcej wskazuje na to, że wewnątrz komórek procesy te przebiegają inaczej niż w probówkach. Wynika to m.in. z faktu, że komórki są niesamowicie ciasno upakowane. Moim celem było zbadanie, co się dzieje pod wpływem tego „zatłoczenia”.

Dla przykładu, spowolnienie ruchu ze względu na zatłoczenie układu przy użyciu kul jest procesem dobrze przebadanym. Ja postanowiłem sprawdzić (przy użyciu symulacji komputerowych) co stanie się, jeśli tę samą objętość zajmą cząsteczkami podłużnymi. Okazało się, że efekt spowolnienia ruchliwości jest wtedy wyraźnie większy. Nasi współpracownicy z uniwersytetu RWTH w Aachen zaobserwowali podobny efekt w badaniach metodą spektroskopii korelacji fluorescencji. Ponadto, wykazałem, że zatłoczenie może powodować, iż reakcje chemiczne zyskują cechę kooperatywności, co przejawia się w skokowych zmianach stężeń równowagowych pod wpływem zmiany pewnych parametrów, takich jak temperatura czy stężenie jonów. Biologia jest pełna takich „czułych” reakcji, a okazuje się, że ta cecha może również powstać w wyniku zatłoczenia.

Co było niezbędne do prowadzenia symulacji?

Początkowo używałem programu do dynamiki brownowskiej BDBOX. Następnie stworzyłem własny pakiet, pyBrown, i kolejne symulacje wykonywałem już przy jego użyciu. Zarówno w jednym jak i w drugim przypadku, Cyfronet wspierał mnie, gdy napotykałem problemy. Zawsze mogłem liczyć na pomoc, gdy czegoś nie byłem pewny lub gdy coś uparcie „odmawiało współpracy”. Uczestniczyłem w szkoleniu, które wprowadziło mnie w zagadnienia związane z użytkowaniem komputerów dużej mocy. W czasie studiów doktoranckich miałem okazję korzystać z Prometheusa, na tamten moment najszybszego komputera w Polsce, co było bardzo ekscytujące samo przez się.

Choć postęp naukowy opiera się bardziej na pomysłach niż na narzędziach, to należy przyznać, że superkomputery to narzędzie, bez których badania – w takiej dziedzinie jak moja – musiałyby być prowadzone w sposób bardziej ograniczony. Dzięki dostępowi do infrastruktury PLGrid mogłem zadawać dużo trudniejsze pytania badawcze i nie iść na kompromisy jeśli chodzi o jakość obliczeń. W moich badaniach, z jednej strony, pojedyncza symulacja musiała być niezwykle długa, by pozwolić ruszającym się cząsteczkom „wyczuć”, że znajdują się w środowisku zatłoczonym. Z drugiej strony, dynamika tego typu jest stochastyczna i każda symulacja przynosi inne rezultaty. To, co chcemy uzyskać, czyli tzw. współczynnik dyfuzji, wynika z uśrednienia losowych ruchów tysięcy cząsteczek. Dodatkowo więc każdą symulację należało przeprowadzić wielokrotnie – w wielu kopiach. Zdecydowanie polecam zasoby badawcze Cyfronetu każdemu, kto napotyka podobne wyzwania techniczne w swojej pracy badawczej.

Jak wspomina Pan studia doktoranckie?

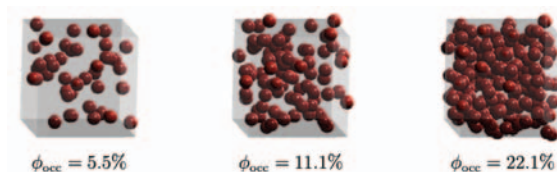
Praca teoretyka jest w przeważającej mierze pracą samotną. Mimo to, miałem przyjemność współpracować z wieloma różnymi naukowcami. Zawdzięczam to mojemu promotorowi, który kładł duży nacisk na współpracę badawczą.

Najwięcej radości przynosiło uczucie zrozumienia. To poczucie, że świat nagle stał się w jakimś aspekcie jaśniejszy. Niestety, uczucie to jest raczej oszczędnie i nieregularnie dawkowane, stąd wskazana jest cierpliwość i pokora. Studia doktoranckie to nie są „po prostu” trudniejsze studia magisterskie. Nie chodzi tu o oceny, rozwiązywanie zadań, itp., a głównym wyzwaniem staje się stawianie dobrych pytań. Warto o tym wiedzieć, żeby zaoszczędzić sobie początkowego uczucia zagubienia.

Jakie są Pańskie plany na przyszłość?

Przede mną postdoc na University of Utah w Salt Lake City. Mam nadzieję maksymalnie spożytkować ten czas, by po powrocie do Polski zacząć samodzielną karierę badawczą. Jak piłkarze, myślę tylko o kolejnym meczu. Jak przyjdzie pora na kolejny krok w karierze, to liczę, że się zorientuję.

Dziękujemy za rozmowę i życzymy dalszych sukcesów.



Układy biologiczne cechuje tzw. zatłoczenie makrocząsteczkowe, które wywiera duży wpływ na ruchliwość cząsteczek i równowagi reakcji chemicznych. W mojej pracy badałem te efekty używając symulacji komputerowych, reprezentując makrocząsteczki przy pomocy prostych modeli, takich jak kule i łańcuchy kul, o różnym stężeniu