

Pektyny stanowi najbardziej złożony pod względem budowy rodzin polisacharydów występujących w przyrodzie. Wśród najpopularniejszych owoców dostępnych na rynku spożywczym najbogatszym źródłem pektyn są owoce gruszy, jabłoni oraz owoce cytrusowe, podczas gdy owoce takie jak winogrona czy truskawki, zawierają znacznie mniej tych związków. W organizmach roślinnych pektyny koncentrują się głównie w ścianach komórkowych otaczających rozwijające się komórki, ścianach komórkowych młodych organów roślin oraz w blaszce rodowej. Ze względu na unikalne właściwości fizyczne wynikające ze złożonej nano-struktury tych związków, a także możliwość praktycznego ich wykorzystania w przemyśle farmaceutycznym, spożywczym oraz materiałowym, pektyny stanowią przedmiot licznych badań bio-molekularnych. Badania przeprowadzone przez zespół pracujący w Zakładzie Mikrostruktury i Mechaniki Biomateriałów, w Instytucie Agrofizyki PAN wykazały, że w przypadku wiejących owoców i warzyw takich jak marchew, jabłko czy gruszka, frakcja pektyn rozpuszczalna w słabych zasadach (DASP), ekstrahowana ze ścian komórkowych, posiada zdolność do samo-organizacji i tworzenia regularnych struktur na powierzchni miki. Przypuszcza się, że regularna struktura pełni istotną rolę w utrzymaniu fizycznej integralności ścian komórkowych, a tym samym, w istotny sposób kształtuje jej twardość oraz teksturę owoców i warzyw. Te hipotezy częściowo potwierdzają obserwacje degradacji pektyn ekstrahowanych w trakcie przechowywania owoców i warzyw. Mimo dotychczas zdobytej wiedzy, podstawy teoretyczne mechanizmu tworzenia regularnych struktur jak i sama struktura frakcji pektyn rozpuszczalnych w słabych zasadach nie są znane. Stąd, celem badawczym projektu jest identyfikacja struktury, a także mechanizmu odpowiedzialnego za mechanizm samo-organizacji frakcji pektyn rozpuszczalnych w słabych zasadach, ekstrahowanych z roślinnych ścian komórkowych.

Znaczący postęp w zrozumieniu teoretycznych podstaw wyżej opisanego mechanizmu oraz wynikających z niego właściwości pektyn może zostać dokonany poprzez zastosowanie nowoczesnych metod eksperymentalnych oraz teoretycznych, takich jak mikroskopia sił atomowych (AFM) oraz chemia molekularna. Zakres badawczy projektu ma oryginalny charakter i łączy w sobie zarówno prace eksperymentalne, jak i teoretyczne z zakresu modelowania numerycznego.

W początkowej fazie projektu badania koncentrują się na badaniu eksperymentalnym frakcji DASP. Zadanie to obejmować będzie modyfikacje enzymatyczne pektyn, a następnie obserwacje wyników modyfikacji z użyciem mikroskopii sił atomowych. Badania teoretycznych podstaw zaobserwowanych zjawisk przeprowadzone będą w oparciu o numeryczne techniki modelowania (teoria funkcjonalów gstości - DFT oraz dynamiki molekularnej - MD). Pierwsze zadania studium numerycznego skupione będą na definicji podstawowych "bloków budulcowych" złożonych związków pektynowych - oligomerów poszczególnych w glukozydów. Następnie badane będą interakcje pomiędzy biopolimerami, w poszukiwaniu możliwych, stabilnych konfiguracji. Dalsze badania składu strukturalnego DASP zostaną rozszerzone na zachowanie frakcji DASP w roztworach wodnych i interakcji z innymi cząsteczkami DASP w dużych skupiskach.

Proponowany projekt badawczy oparty na obrazowaniu AFM polisacharydów ścian komórkowych roślin, w połączeniu z chemią obliczeniową umożliwi badanie struktury wybranej frakcji pektyn, przez co ma szansę zwikszy nasz wiedzę o funkcjonalnych właściwościach tych związków oraz ich roli w organizmach roślinnych. Obecnie związki pektynowe są uważane za jeden z głównych czynników kształtujących teksturę owoców i warzyw. Inne dotychczas poznane funkcje pektyn w organizmach roślinnych wskazują na ich znaczącą rolę w mechanizmach wzrostu, rozwoju jak i mechanizmach ochronnych roślin. W przemyśle spożywczym pektyny są cennym źródłem błonnika pokarmowego, którego obecność w diecie pozytywnie wpływa na stan zdrowia człowieka. Zdolność pektyn do tworzenia żeli w roztworach wodnych sprawia, że są one ważnym składnikiem żywności dla gastronomii i przemysłu spożywczego. Zrozumienie fizycznych podstaw zdolności pektyn do żelowania, które wynikają z ich struktury molekularnej, może stanowić cenną informację z punktu widzenia projektowania żywności funkcjonalnej. Badania te mają także szansę na przyczynienie się do poszerzenia stanu wiedzy o modelowaniu matematycznym hierarchicznie zorganizowanych materiałów biologicznych, takich jak ściany komórkowe oraz tkanki roślinne.