

Jednym z największych wyzwań współczesnej inżynierii bioprocessowej jest stworzenie biokatalizatora działającego nieskończenie długo z wysoką wydajnością. W związku z tym praktyczne wykorzystanie immobilizowanych enzymów znajduje głębokie uzasadnienie ekonomiczne. Obok wiązania z nierozpuszczalnym nośnikiem oraz sieciowania, inkluzja enzymów (np. w strukturach hydrożelowych) jest jednym z podstawowych rodzajów immobilizacji. Jest to metoda tania, szybka, umożliwiająca uzyskanie aktywnych preparatów o zwiększonej stabilności i nie wpływająca znacząco na zmianę natywnej struktury enzymów. Niemniej jednak, liczne doniesienia literaturowe dotyczące badań nad immobilizacją enzymów w matrycach hydrożelowych ograniczają się zazwyczaj do wykreślenia profilu właściwości danego biokatalizatora w funkcji badanego parametru (tj. pH, temperatura). Takie informacje są niezbędne do zaprojektowania reaktorów, przy ekonomicznym wykorzystaniu, często najdroższego składnika procesu, jakim jest enzym. Na ogół jednak brakuje wyjaśnienia na poziomie cząsteczkowym mikroskopowego mechanizmu zmian właściwości danego biokatalizatora po procesie inkludowania w matrycach hydrożelowych, m.in. nie analizowany jest wpływ składu chemicznego, właściwości fizycznych oraz stopnia usieciowania zastosowanego nośnika na wydajność immobilizacji danego enzymu. Dostępne są jedynie nieliczne doniesienia dotyczące molekularnego modelowania struktur wybranych materiałów hydrożelowych

Głównym celem proponowanego projektu jest rozpoznanie, wyjaśnienie i opis oddziaływań występujących w tych strukturach hydrożelowych w zależności od ich składu chemicznego oraz korelacja tych oddziaływań ze zmianą właściwości biokatalizatora po immobilizacji, których znajomość jest niezbędna w projektowaniu procesów bioreaktorowych.

Projekt ma charakter interdyscyplinarny i obejmuje przede wszystkim zagadnienia badawcze z zakresu inżynierii bioprocessowej, materiałowej oraz modelowania molekularnego. Z jednej strony zakłada przeprowadzenie szeregu badań eksperymentalnych związanych z otrzymywaniem i charakterystyką matryc hydrożelowych, doboru warunków immobilizacji oraz wyznaczeniem właściwości wybranych enzymów po unieruchomieniu. A z drugiej przeprowadzenie kompleksowego modelowania wieloskalowego, mającego na celu rozpoznanie i ilościowy opis oddziaływań powstających w danej matrycy hydrożelowej w zależności od jej składu chemicznego oraz powiązanie uzyskanych parametrów z wynikami wyznaczonymi eksperymentalnie. Przewiduje się, że zyskane rezultaty pozwolą na dobór dla danego enzymu takiego nośnika hydrożelowego, który zapewni optymalne wykorzystanie jego właściwości katalitycznych. Ponadto, dzięki wstępnemu zaprojektowaniu metodami numerycznymi najbardziej efektywnych układów enzym – hydrożel, kosztowne i czasochłonne eksperymenty mogłyby zostać ograniczone do weryfikacji w wyznaczonym zakresie parametrów, bliskim wartościom optymalnym.