

ZNACZENIE: Naturalnie występujące kryształy charakteryzują się bogactwem form i zachwycających kształtów. W szczególności, różnorodność biologicznie powstałych minerałów fascynowała ludzkość przez wieki. Morfologia kryształu ustalona zostaje w procesie zwanym krystalizacją, prawdopodobnie na najwcześniejszym etapie, to znaczny zarodkowania (nukleacji). W klasycznym obrazie procesu, kryształy powstają w uporządkowanym procesie sekwencyjnego dokładania elementów budulcowych do wzrastającego zarodka.

Jednakże, dzięki postępowi w wysoko-rozdzielczej transmisyjnej mikroskopii elektronowej, zarodkowanie okazało się znacznie bardziej skomplikowanym zjawiskiem niż dotychczas uważano. Okazuje się, że natura może formować kryształy wykorzystując wiele ścieżek, sprzecznych z obrazem klasycznym. Te ścieżki prawie zawsze przebiegają przez etap samo-organizacji stabilnych prekursorów nukleacji – struktur całkowicie sprzecznych z klasycznym obrazem zarodkowania.

Pomimo szeregu obserwacji tych nieklasycznych ścieżek nukleacji, wciąż brakuje zrozumienia procesu na poziomie molekularnym. Na przykład, słabo poznana jest współgranie kinetycznie i termodynamicznie kontrolowanych etapów zarodkowania, rola oddziaływań międzycząsteczkowych, struktury i dynamiki roztworu oraz natura sił napędowych w poszczególnych transformacjach.

Wśród wielu fundamentalnych aspektów nieklasycznej krystalizacji, które wciąż nie zostały poznane, najwcześniejsze etapy nukleacji stanowią największe wyzwanie. Jest to podyktowane ulotnym i metastabilnym charakterem prekursorów, co również utrudnia ich eksperymentalne wykrycie.

CEL: Celem tego projektu jest zrozumienie wczesnych etapów krystalizacji na poziomie molekularnym, w szczególności w prenukleacji białek i minerałów. Występowanie prekursorów nukleacji jest dowodem na krystalizację według nieklasycznych ścieżek, które uważa się, że dominują w naturalnie powstających (bio)minerałach i kryształach biomolekuł.

PROPONOWANE BADANIA: W celu wypełnienia braków w zrozumieniu procesu nukleacji białek i minerałów proponujemy synergistyczne połączenie modelowania molekularnego z czasowo-rozdzielczą ciekłą transmisyjną mikroskopią elektronową. W tym projekcie zadajemy podstawowe pytania na temat fizykochemii procesów stojących za pojawianiem się prekursorów nukleacji, w szczególności klastrów prenukleacji i gęstych, ciekłych nanokropel w roztworze macierzystym. Poszukujemy zrozumienia jaką kontrolę nad wyborem ścieżki nukleacji, stabilnością i strukturą faz pośrednich oraz kinetyką samoorganizacji sprawują reakcje kwasowo-zasadowe oraz dodatki związków pomocniczych.

WPLYW I ZNACZENIE WYNIKÓW: Zrozumienie najwcześniejszych etapów nukleacji białek i minerałów na poziomie molekularnym niesie nadzieje na znaczący postęp w wielu dziedzinach: od krystalizacji białek – etapu limitującego wyznaczanie ich struktury, po spójniejsze poznanie obiegu pierwiastków w środowisku, w tym biogeochemicznej przeszłości i teraźniejszości naszej planety. Ostatecznym celem jest możliwość kontrolowania ścieżek krystalizacji tak by móc otrzymać monokryształy o określonych właściwościach, rozmiarze i kształcie.