

STRESZCZENIE

1. Cel prowadzonych badań/hipoteza badawcza

W projekcie tym badana będzie samoorganizacja i proces krystalizacji mikrowłókien celulozy z różnymi wkładami alomorfów I α /I β w obecności części nieuporządkowanych, mechaniczna charakteryzacja poprzez eksperymentalną i obliczeniową nanoindentację AFM oraz oddziaływania z kompleksami białek będących w kręgu zainteresowań przemysłu. Agregaty mikrowłókien celulozy mają wiele funkcji w roślinach i bakteriach, od zwiększania sztywności układu ściana – komórka i wytrzymałości na rozciąganie aż do ochrony środowiska. Stąd, proponowane badania zasadniczo koncentrują się odnawialnych źródłach energii. Zakres tego projektu poprawi nasze zrozumienie struktury celulozy i pozwoli na charakteryzację procesów agregacji i krystalizacji.

2. Metoda Badawcza

Agregacja i samoorganizacja mikrowłókien celulozy są podyktowane przez wspólne zachowanie się i oddziaływanie pomiędzy monomerami glukozy. Ponadto, z uwagi na duże skale czasowe i przestrzenne konieczne do opisu takich procesów, modele grubizoarniste są w tym przypadku najlepszym rozwiązaniem. Część teoretyczna projektu będzie oparta na dynamice molekularnej w ramach modelu gruboziarnistego opartego na strukturze (t.j. podejście Go) i wykorzystaniu pól siłowych z modeli pełnoatomowych. We współpracy z eksperymentatorami Stefanem Weberem i Horacio Vargasem z Instytutu Maxa Plancka nanomechaniczna charakteryzacja mikrowłókien celulozy będzie potwierdzona eksperymentalnie. Takie podejście jest optymalnym dla procesów samoorganizacji wielu włókien biologicznych takich jak poliglutaminy czy włókna amyloidowe.

3. Wpływ projektu badawczego

Zrozumienie związku struktura-funkcja jest podstawowym zainteresowaniem w wielu dziedzinach. Z racji tego, że jest to istotne również w wielu procesach biologicznych, gdzie struktura natywna białek definiuje ich specjalną funkcję, podobnie do współistnienia faz I α /I β celulozy z obszarami nieuporządkowanymi determinuje funkcję mechaniczną, która ma duży wpływ na procesy przemysłowe.

Prawdziwe przejście do gospodarki opartej na strukturach biologicznych będzie możliwe tylko poprzez badania podstawowych surowców odnawialnych. Na przykład degradacja celulozy pochodzącej z uprawy doprowadziła ludzkość do produkcji biopaliw, ale proces nie jest w pełni zrównoważony, ponieważ posiada poważne problemy społeczne takie jak dylematy „żywność czy paliwo”. Odpady rolnicze i biomasa miejska są jednymi z najlepszych źródeł celulozy dla konwersji do biopaliw, ale wciąż proces ten nie jest wystarczająco efektywny. Lepsze zrozumienie oddziaływań celuloza – enzym może pozwolić na szybkie przejście do zielonej gospodarki.