

Celem tego projektu jest poszerzenie wiedzy na temat hybrydowych systemów białkowo-grafenowych poprzez stworzenie multidyscyplinarnego zespołu chemików i fizyków. Nasz projekt badawczy koncentruje się na zastosowaniu metod modelowania molekularnego do zaprojektowania i opisu nowych hybrydowych interfejsów białkowo-grafenowych, połączonych z biologicznymi lub organicznymi linkerami jako potencjalnych kandydatów na urządzenia bioelektroniczne, takie jak bioczuJNIKI, ogniwa biopaliwowe itp. Badanymi białkami są małe układy antenowe zbierające energie świetlną, podczas gdy komponentem materiałowym jest grafen, który został wybrany ze względu na jego niezwykle interesujące właściwości elektroniczne. Grafen jest pojedynczą warstwą atomów węgla połączonych ze sobą w dwuwymiarowej strukturze plastra miodu. Ta osobliwa struktura odpowiada za niezwykle wysoki transfer ładunku. Nasz projekt będzie koncentrować się na oddziaływaniach modelowych białek z łącznikami i warstwą grafenu jako materiału przewodzącego i nośnika ładunku. Głównym celem tego projektu jest odpowiedź na pytanie jak zahamować niepożądaną rekombinację ładunków obserwowaną na granicy faz pomiędzy białkami i grafenem.

Sposób, w jaki te składniki (komponenty biologiczne, linkery i grafen) oddziałują ze sobą ma kluczowe znaczenie dla zaprojektowania i stworzenia działającego urządzenia, w związku z czym niezbędne jest zbadanie natury takich interfejsów. Dzięki zastosowaniu metod symulacji w skali atomowej zbadamy energię wiązania, która decyduje o sile oddziaływania pomiędzy białkami a grafenem. Bardziej złożony interfejs zostanie zbudowany przez dodanie monowarstwy cząsteczek samoorganizujących się (SAM), takich jak pochodne pirenu i azobenzenu, pomiędzy grafenem a linkerem biologicznym, co może poprawić transportu ładunków w interfejsie, jak również stabilność system.

W tym projekcie wykorzystamy wieloskalowe podejście obliczeniowe do opisu chemicznych i fizycznych właściwości systemów będących przedmiotem naszego zainteresowania. Najpierw opiszemy ewolucję w czasie modelowych białek, linkerów i grafenu za pomocą klasycznej dynamiki molekularnej, polegającej na modelowaniu atomów połączonych ze sobą sprężynkami. Metoda ta pozwala na prowadzenie obliczeń dla realistycznych układów modelowych (złożonych z tysięcy atomów) w dużych skalach czasowych (setki nanosekund), Analiza energii tych układów pozwoli nam na ilościowe określenie energii oddziaływania i stabilności takiego układu hybrydowego.

W kolejnych etapach skoncentrujemy się na mniejszych częściach naszego układu (np. tylko na kilku kluczowych aminokwasach białek) przy użyciu bardziej wyrafinowanych i dokładnych metod obliczeniowych, które pozwolą na opisanie i zrozumienie mechanizmu przenoszenia elektronów występującego w interfejsie. Aby osiągnąć ten cel, podzielimy system na dwa bloki, z których każdy przedstawia 1 interfejs: białko-SAM, SAM-grafen. Używając podejścia kwantowo-mechanicznego przeanalizujemy funkcję falową i wynikające z niej zmiany właściwości elektronowych grafenu.

Nasz projekt oferuje racjonalne projektowanie nowatorskich złożonych systemów złożonych z białek i powierzchni organicznych, z możliwym wykorzystaniem takiego interfejsu w przyszłości jako bio-organicznych ogniw fotowoltaicznych i tranzystorów, które mogą rozwiązać problem szybko rosnącego zużycia energii na świecie. Proponowany projekt przyczyni się do lepszego zrozumienia wpływu grafenu na stabilność i właściwości fizyczne i chemiczne centrum reakcji fotosystemu i na odwrót. Kompleksowe podejście teoretyczne zapewnia nam dokładną charakterystykę nowych systemów i prowadzi do opracowania racjonalnego projektowania nowych złożonych interfejsów bio-organicznych.