

Otrzymywanie nowych materiałów o ściśle kontrolowanych właściwościach ma niezwykle istotne znaczenie z aplikacyjnego punktu widzenia oraz przeżywa obecnie burzliwy rozwój. Dla naukowców natomiast, nadrzędnym celem jest zrozumienie oraz ilościowy opis fundamentalnych praw i zjawisk determinujących takie właściwości. Pozwala to na jeszcze lepszą kontrolę otrzymywanych materiałów oraz przewidywanie ich właściwości już na etapie syntezy. Niestety, często materiały o wyrafinowanych właściwościach są trudne do zrozumienia za pomocą dostępnych narzędzi i wymagają interdyscyplinarnego i komplementarnego podejścia w celu wyjaśnienia rządzących nimi praw.

Jedną z klas materiałów cieszących się niezwykle dużym zainteresowaniem są kompleksy polipeptydów, których synteza opiera się na mieszanii roztworów polipeptydów o przeciwnych ładunkach. Polipeptydy, w odróżnieniu od syntetycznych polimerów które często wykazują toksyczne działanie, są znacznie mniej szkodliwe, przez co znajdują szerokie zastosowanie w medycynie i biotechnologii, np. jako wektory w terapii genowej czy nośniki leków. Poprzez dobór odpowiednich warunków syntezy, możemy kontrolować właściwości tych materiałów, np. sterować uwalnianiem leków z kapsulek, wytwarzać materiały samoorganizujące, czy też reagujące na bodźce zewnętrzne, takie jak temperatura czy pH.

Do zrozumienia przyczyn właściwości wykazywanych przez nowe materiały niezbędne są badania zakrojone na szeroką skalę obejmującą wszystkie etapy syntezy. Często, już informacja o tym jak makrocząsteczki, będące podstawowym budulcem materiału, zachowują się w warunkach syntezy może nam pomóc przewidzieć niektóre właściwości materiału. Poza badaniami eksperymentalnymi, niezwykle istotne są równoległe prowadzone badania teoretyczne. Stanowią one komplementarne narzędzie i pozwalają na uzyskanie informacji niedostępnych dla technik eksperymentalnych oraz na ilościowe opisanie i dogłębne zrozumienie badanych procesów.

Niniejszy projekt, ma na celu obszerne badania teoretyczne i eksperymentalne nad otrzymywaniem kompleksów polipeptydów, które połączą warunki syntezy z właściwościami finalnych materiałów. Pozwoli to przewidywać i znacznie lepiej kontrolować proces powstawania takich filmów.

W pierwszym etapie, autorzy skupią się na wyznaczeniu zależności pomiędzy warunkami procesu formowania kompleksu a właściwościami pojedynczych polipeptydów. Zarówno modelowanie molekularne z rozdzielczością atomową, jak również szereg technik eksperymentalnych dostarczą informacji o tym jak zmienia się kształt, ładunek oraz konformacja cząsteczki w zależności od pH czy siły jonowej roztworu.

Kolejnym etapem badań będzie zrozumienie oddziaływań pomiędzy przeciwnie naładowanymi polipeptydami. Celem tego etapu będzie poznanie mechanizmu i termodynamiki procesu kompleksacji polipeptydów w zależności od warunków syntezy, jak również szczegółowy opis otrzymywanych struktur i ich właściwości. Głównym narzędziem będzie modelowanie teoretyczne uzupełnione o izotermiczne miareczkowanie kalorymetryczne, które dostarczy cennych informacji na temat sił napędowych procesu formowania kompleksów.

Ostatnim etapem będzie wytworzenie i charakteryzacja kompleksów polipeptydów. Badania mają na celu określenie zmian we właściwościach mechanicznych i termicznych spowodowanych różnymi warunkami syntezy. Dostarczą one informacji na temat wpływu efektywnego ładunku cząsteczki oraz jej konformacji na makroskopowe właściwości kompleksów. Korelacja wyników otrzymanych dla kompleksów polipeptydów z fundamentalnymi właściwościami pojedynczych cząsteczek będzie stanowić niezwykle przydatne narzędzie predykcyjne pozwalające na bardziej świadome kontrolowanie właściwości tych materiałów.

Takie innowacyjne wieloetapowe podejście, łączące w sobie modelowanie teoretyczne oraz badania eksperymentalne, przeprowadzone we współpracy z wiodącymi ośrodkami zagranicznymi z Finlandii i USA, pozwoli na dogłębne zrozumienie tych niezwykle interesujących i obiecujących materiałów.