Enzymy – białka katalizujące reakcje chemiczne – od lat fascynują badaczy. Są one istotnym elementem życia i wraz z nim ewoluują pomagając w utrzymaniu równowagi potrzebnej do zachodzenia procesów życiowych. Od kilku lat proces ich poznania, a w konsekwencji możliwości optymalizacji ich właściwości został przyspieszony przez zastosowanie narzędzi opartych o sztuczną inteligencję i metody uczenia maszynowego jak również o wysoko przepustowe metody eksperymentalne pozwalające na przeprowadzanie milionów analiz dziennie. Jednak większość z tych metod została zadedykowana enzymom katalizującym reakcje prowadzone w roztworze z udziałem zwykle niewielkich molekuł. Tymczasem reakcje enzymatyczne przebiegające na granicy faz – cieczy i ciała stałego, są niemal zupełnie nieznane.

Do wyjątków możemy zaliczyć enzymy degradujące polimery naturalne budujące świat roślin, grzybów i niektórych zwierząt: ligninę, chitynę i celulozę. Tymczasem działalność przemysłowa i wprowadzenie do użytku sztucznych, niemal nie ulegających degradacji polimerów, wymusza konieczność poszukiwania przyjaznych dla środowiska rozwiązań pozwalających zredukować nasz niekorzystny wpływ na planetę.

W ramach przedstawionego przez nas projektu chcemy poszukać metod umożliwiających szybkie projektowanie enzymów zdolnych do degradacji skomplikowanych niejednorodnych polimerów syntetycznych. Chcemy odpowiedzieć na szereg pytań: jakie czynniki regulują specyfikę wiązania enzymu do ciała stałego, jak selektywny może to być proces, czy możliwe jest zaczerpnięcie wzorców z natury i nauczenie enzymów degradacji tworzyw sztucznych o często hydrofobowym charakterze powierzchni. Do tego celu zamierzamy rozwinąć metody obliczeniowe i eksperymentalne, i zaprojektować enzymy skutecznie degradujące poliuretany.