

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN prowadzi badania eksperymentalne oraz teoretyczne w obszarze szeroko rozumianej chemii powierzchni, koloidów, nanostruktur materii miękkiej, chemii materiałów, oraz katalizy enzymatycznej. W ramach działalności w SDNŚiP, badania obejmują zastosowanie zaawansowanych metod modelowania molekularnego w następujących aspektach:

I. Konformacja węglowodanów

Sacharydy są zróżnicowaną grupą naturalnych biomolekuł, odgrywającą kluczową rolę w organizmach żywych jako podstawowe źródło energii, materiał budulcowy oraz czynnik regulujący różne procesy metaboliczne, wpływając zarówno na zdrowie ludzi, jak i funkcjonowanie ekosystemów. Badania nad tymi układami skoncentrowane są na szczegółowej analizie dynamicznej struktury istotnych z punktu widzenia biologii oraz chemii mono-, di-, olig- i polisacharydów przy użyciu różnych metodologii modelowania molekularnego, w tym metod mechaniki kwantowej, symulacji prowadzonych metodami dynamiki molekularnej przy użyciu klasycznych, atomistycznych pól siłowych oraz modelowania gruboziarnistego. W szczególności, badania dotyczą m.in. interpretacji mierzalnych parametrów spektroskopii NMR.

II. Rozwijanie metod obliczeniowych *enhanced-sampling*

W tym zakresie badania obejmują tworzenie oraz walidację klasycznych pól siłowych działających w zakresie rozdzielczości atomowych oraz gruboziarnistych. Ponadto, ulepszone są istniejące oraz tworzone nowe zaawansowane metody próbkowania w symulacjach dynamiki molekularnej (tzw. metody *enhanced-sampling*). Prace tego typu skutkują opracowaniem spójnych metodologii, umożliwiających bardziej efektywne a także dokładniejsze symulacje różnorodnych układów molekularnych.

III. Modelowanie zdegradowanych nanoplastików

Pod wpływem promieniowania słonecznego, temperatury i sił mechanicznych odpady tworzyw sztucznych ulegają fragmentacji na coraz mniejsze cząstki, osiągając ostatecznie skalę nanometrową. Te nanocząstki - potocznie nazywane nanoplastikami - wykazują odmienne właściwości chemiczne niż materiały źródłowe. Celem badań jest komputerowe modelowanie tworzenia się nanoplastików i ich dalszej interakcji z biologicznie ważnymi obiektami. Etapy badań obejmują m.in. modelowanie procesów chemicznej degradacji materiałów molekularnych z tworzyw sztucznych; analiza i klasyfikacja wygenerowanych powierzchniowych grup funkcyjnych; analiza interakcji zdegradowanych cząstek nanoplastików z białkami osocza krwi oraz analiza wpływu powierzchniowych grup funkcyjnych na procesy przenikania nanoplastiku przez błony lipidowe. Symulacje tego typu pozwalają na ocenę skali zagrożenia nanoplastikami dla organizmów żywych oraz umożliwi lepsze zrozumienie związanych z nimi zjawisk na poziomie molekularnym.