

Abstract (Polish)

Ściana komórkowa roślin jest wysoce uporządkowaną i wyspecjalizowaną siecią, utworzoną głównie z polisacharydów, glikoproteinów, związków fenolowych, minerałów i enzymów. Główne funkcje ściany komórkowej roślin są stosunkowo dobrze znane – kontrola morfogenezy roślin, jej architektury, zarządzanie reakcjami mechanicznymi, wytrzymałością, elastycznością, odpornością, wzrostem, komunikacją międzykomórkową itp. Pomimo niespójności relacji między strukturą a właściwościami ściany komórkowej roślin, która jest tematyką dyskusyjną od końca lat 60-tych XX wieku, rola interakcji celuloza-hemiceluloza w odniesieniu do mechanobiologii ściany komórkowej roślin nie jest kwestionowana. Celuloza jest głównym składnikiem ściany komórkowej roślin przenoszącym obciążenia, a właściwości mechaniczne ściany komórkowej roślin są zależne od interakcji pomiędzy włóknami celulozy, w których pośredniczą hemicelulozę.

Pomimo znaczącego w ostatnich latach postępu z badaniami ściany komórkowej, wciąż pozostaje wiele pytań dotyczących właściwości fizykochemicznych polisacharydów ścian komórkowych roślin i ich właściwości mechanicznych. Istnieje kilka podejść metodycznych w tej kwestii. Ściana komórkowa roślin może być badana bezpośrednio poprzez dekompozycję jej składników w ścianie komórkowej (in muro), hamowanie biosyntezy, rozpuszczenie in vitro lub modyfikację chemiczną. Jednak ocena właściwości mechanicznych ściany komórkowej roślin jest poważnie ograniczona przez stosowane techniki eksperymentalne, co sprawia, że wyniki są zmienne i uzależnione od kontekstu badań. Manipulowanie materiałem ściany komórkowej roślin jest również wyzwaniem, gdy chodzi o badania pojedynczych komórek, gdyż wyniki są uzależnione od lokalizacji materiału badawczego w ścianie komórkowej roślin. Opracowanie analogów ściany komórkowej roślin w postaci celulozy bakteryjnej i hemiceluloz ściany komórkowej roślin może służyć jako narzędzie do uzyskania uproszczonych reprezentacji ściany komórkowej roślin w makroskali, które mają jednorodną strukturę i są powtarzalne. Dotychczas, podobne podejście umożliwiło skatalogowanie wpływu głównych polisacharydów ściany komórkowej roślin na strukturę i właściwości mechaniczne analogów ściany komórkowej roślin, oraz zdefiniowanie mechanizmów interakcji polisacharydów z celulozą. Jednak, konwencjonalne techniki laboratoryjne sprawiają trudności z określeniem sił adhezji pomiędzy włóknami celulozy, co jest kluczowe dla mechanobiologii ściany komórkowej roślin. Modelowanie numeryczne in silico pozwala na przybliżenie struktury i właściwości mechanicznych ściany komórkowej roślin w odniesieniu do składu, parametrów przestrzenno-czasowych i właściwości fizykochemicznych polisacharydów ściany komórkowej roślin. Pozwala to również na uzyskanie wglądu w strukturę i mechanikę sieci w odniesieniu do specyfiki jej tworzenia, gęstości, lokalizacji i siły połączeń pomiędzy celulozą a hemicelulozami oraz roli innych polisacharydów ściany komórkowej roślin.

W niniejszej rozprawie doktorskiej dokonano przeglądu wiedzy dotyczącej właściwości mechanicznych celulozy bakteryjnej, hemiceluloz (ksylanu, arabinoksyланu, ksyloglukanu i glukomananu), dwuskładnikowych (celuloza bakteryjna-hemicelulozy) i trójskładnikowych (celuloza bakteryjna-hemicelulozy-pektyn) analogów ściany komórkowej roślin oraz przedyskutowano je z uwzględnieniem określonych polisacharydów, ich pochodzenia, metod produkcji, stosowanej obróbki oraz różnych podejść metodologicznych do syntezy celulozy bakteryjnej.

W dalszej części rozprawy doktorskiej skupiono się na analizie podstaw teoretycznych istniejących modeli numerycznych ściany komórkowej roślin w odniesieniu do struktury sieci włókien, jej właściwości supramolekularnych i powinowactwa wiązania polisacharydów. W tym celu przeprowadzono przegląd istniejących koncepcji struktury ściany komórkowej roślin, co pozwoliło na włączenie pewnych fizycznych i biomechanicznych aspektów architektury ściany komórkowej roślin do zrozumienia mechanizmów, które pozwalają kontrolować mechaniczne odpowiedzi ściany komórkowej roślin.

W kolejnym etapie pracy zbadano właściwości mechaniczne i molekularne celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin w celu określenia wpływu właściwości fizykochemicznych różnych hemiceluloz (ksylan, arabinoksyлан, ksyloglukan i glukomannan) na ogólną wydajność mechaniczną celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin pod względem deformacji sprężystej i plastycznej. Przeprowadzone badania potwierdziły, że właściwości mechaniczne celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin determinowane są głównie przez odkształcenie włókien celulozy, w łączeniu których pośredniczą hemicelulozy. Podczas gdy odkształcenie sprężyste celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin jest uwarunkowane drganiami rozciągającymi wiązań strukturalnych celulozy i hemicelulozy, odkształcenie plastyczne jest związane ze zmianami na poziomie supramolekularnym zachodzącym w strukturze celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin.

W dalszej części rozprawy doktorskiej skupiono się na opracowaniu modelu numerycznego celulozowo-hemicelulozowych analogów ścian komórkowych roślin. Opracowano model numeryczny z użyciem metody gruboziarnistej dynamiki molekularnej, gdzie włókna polisacharydów modelowano przy użyciu kulek i sprężyn. Aby zweryfikować model i wyjaśnić strukturalną i mechaniczną rolę hemiceluloz, celulozę bakteryjną syntetyzowano w obecności różnych stężeń ksylanu, arabinoksyланu, ksyloglukanu lub glukomannanu i poddano analizom strukturalnym i mechanicznym w nano i makroskali. Uzyskane dane wykorzystano do interpretacji wpływu każdego rodzaju hemicelulozy na właściwości mechaniczne celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin w oparciu o czułość modelu. Uzyskano zgodność strukturalną pomiędzy modelem a zsyntetyzowanymi analogami ściany komórkowej roślin. Zaobserwowano, że właściwości mechaniczne celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin nie są determinowane przez odkształcenie

samej hemicelulozy, ale głównie przez odkształcenie włókien celulozowych, w którym pośredniczą hemicelulozy. Takie mediatory, koncepcyjnie podobne do biomechanicznych hotspotów występujących in muro, zmieniają siłę oddziaływania między włóknami, będąc głównym czynnikiem wpływającym na właściwości mechaniczne celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin. Ponadto na siłę oddziaływania między włóknami wpływ mają także cechy morfologiczne celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin, takie jak szerokość/długość/moduł włókna. Wykazano również, że uzyskane eksperymentalnie właściwości mechaniczne celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślinnej odpowiadają właściwościom symulowanych sieci, co potwierdza przydatność opracowanych modeli do badania mechanobiologii sieci włókien celulozowych.

W ramach badań uzupełniających przeprowadzono badania wpływu specyficznych enzymów degradujących hemicelulozy na strukturę i właściwości mechaniczne celulozowo-hemicelulozowych analogów ściany komórkowej roślin. Badania wykazały, że hemicelulozy zawarte w sieci włókien celulozy bakteryjnej istnieją jako dostępne i niedostępne dla enzymów. W konsekwencji oceniono, że hemicelulozy niedostępne dla enzymów są kluczowe dla trendów zmiany właściwości mechanicznych analogów, podczas gdy hemicelulozy dostępne dla enzymów powodują fluktuację danych.

Słowa kluczowe: celuloza bakteryjna, hemicelulozy, analogi ściany komórkowej roślin, właściwości mechaniczne, symulację dynamiką molekularną.