

УДК 50.501

## **ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ БЕЛКА С ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНОЙ ЩЕТКОЙ: ПРИБЛИЖЕНИЕ ПУАССОНА-БОЛЬЦМАНА**

**Саламатова Т. О.** (федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»)

**Научный руководитель – доктор физико-математических наук, Борисов О. В.**

(федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»)

**Введение.** Взаимодействие глобулярных белков с полиэлектролитами активно исследуется как теоретически, так и экспериментально. Это мотивировано прежде всего возможностью разделения ферментов, созданием высокоэффективных бионанокаталитических систем, разработкой сенсоров и систем, реагирующих на внешние стимулы. Примечательно, что абсорбция белков полиэлектролитными щетками (ПЭ) может происходить на «обратной» стороне изоэлектрической точки, т. е. когда белок и щетка заряжены одноименно [1-2]. Такое поведение системы позволяет сохранять ее коллоидную стабильность, а также ферментативные свойства абсорбируемых белков.

**Основная часть.** Приближение самосогласованного поля Пуассона-Больцмана используется для расчета общей свободной энергии введения белковоподобной нанокolloидной частицы в плоскую ПЭ щетку и анализа равновесного распределения глобулярных белков между щеткой и буферным раствором в условиях доминирования электростатических взаимодействий. Мы демонстрируем, что абсорбция белковоподобного нанокolloида может быть термодинамически выгодна, даже если белок имеет заряд аналогичный щетке. Электростатическое поле, создаваемое щеткой, вызывает неравномерное (согласно закону Больцмана) распределение противоионов между объемом щетки и буферным раствором, что служит причиной уменьшения свободной энергии ионизации рН- чувствительных групп на поверхности глобулы при погружении белка в щетку. Важно отметить, что смена знака поверхностного заряда глобулы является необходимым, но не достаточным условием для спонтанной абсорбции белка ПЭ щеткой [1]. В работе представлены зависимые от положения белка относительно поверхности прививки профили свободной энергии введения белковоподобной нанокolloидной частицы в щетку. Показано, что изменение (i) внешних условий среды (рН и ионной силы раствора), (ii) размеров частицы и количества ионизируемых (кислых и основных) групп на ее поверхности, (iii) архитектурных параметров щетки может приводить к спонтанному поглощению или же, напротив, к кинетически или термодинамически затрудненной абсорбции белковоподобной нанокolloидной частицы щеткой. Профиль свободной энергии может иметь различную форму: она может монотонно увеличиваться по мере приближения к поверхности прививки, иметь потенциальный барьер или потенциальную яму. В соответствии с экспериментальными наблюдениями [3-4], теория предсказывает, что белковая глобула может быть спонтанно поглощена аналогично заряженной щеткой при низкой ионной силе, но этого не происходит при высокой ионной силе раствора.

**Выводы.** Проведен анализ влияния вышеприведенных параметров на абсорбцию белка щеткой. Разработана модель для прогнозирования характера взаимодействия различных глобулярных белков с полиэлектролитными щетками.

### **Список использованных источников:**

1. Laktionov, M.Y.; Zhulina, E.B., Borisov, O.V. Proteins and polyampholytes interacting with polyelectrolyte brushes and microgels: the charge reversal concept revised. *Langmuir*, 37, 2865–2873 (2021).

2. Wittemann, A.; Haupt, B.; Ballauff, M. Adsorption of proteins on spherical polyelectrolyte brushes in aqueous solution. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 5, 1671–1677 (2003).
3. Wittemann, A.; Ballauff, M. Interaction of proteins with linear polyelectrolytes and spherical polyelectrolyte brushes in aqueous solution. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 8, 5269–5275 (2006).
4. Becker, A. L.; Henzler, K.; Welsch, N.; Ballauff, M.; Borisov, O. Proteins and polyelectrolytes: A charged relationship. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* 17, 90–96 (2012).