

УДК 50.501

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ рН-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ ЩЕТОК С АМФОЛИТНЫМИ НАНОКОЛЛОИДНЫМИ ЧАСТИЦАМИ: ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

Попова Т. О. ( «Национальный исследовательский университет ИТМО»)

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

( «Национальный исследовательский университет ИТМО»,

Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук)

**Введение.** Исследование взаимодействия полиэлектролитных щеток с глобулярными белками, которые являются полиамфолитами с рН-чувствительными кислотными, основными и нейтральными аминокислотными остатками на поверхности, представляют значительный научный интерес в настоящее время. Изучение таких систем мотивировано множеством практических приложений, включая адресную доставку лекарств в организме [1], специфическое разделение белков, создание коллоидных бионанореакторов и синтетических биоадгезивов. Примечательно, что абсорбция белков полиэлектролитными (ПЭ) щетками может происходить на «неправильной» 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.** Рассматриваемая система состоит из плоской/сферической ПЭ щетки, цепи которой представлены слабыми (рН-чувствительными) полиэлектролитами, несущими положительный/отрицательный заряд, и модельного белка с заданными характеристиками: соотношением катионных и анионных групп на поверхности и их константами ионизации. Изучение описанной системы проводилось в рамках приближения самосогласованного поля Пуассона – Больцмана. В работе исследуются зависимости (i) толщины щетки, (ii) электростатического потенциала от архитектурных параметров щетки и внешних условий среды, а также зависимость (iii) абсорбции модельного белка щеткой на «неправильной» стороне изоэлектрической точки (ИЭТ), то есть, когда белок и щетка имеют одинаковый знак заряда. Источником движущей силы абсорбции является перезарядка катионных и анионных групп на поверхности белка, которая вызвана взаимодействием с электростатическим полем, создаваемым щеткой. Показано, что контролировать абсорбцию на «неправильной» стороне ИЭТ возможно путем (i) изменения рН и ионной силы раствора, (ii) изменения параметров глобулы, (iii) изменения параметров щетки [3]. Интересно, что абсорбция белков рН-чувствительной ПЭ щеткой качественно отличается от абсорбции сильной (не рН-чувствительной) щеткой за счет изменения степени ионизации щетки по мере приближения к поверхности прививки.

**Выводы.** В результате теоретического моделирования был проведен анализ влияния внешних условий среды и архитектуры щетки на ее взаимодействие с различными белками. Разработана модель для прогнозирования характера взаимодействия глобулярных белков со слабыми полиэлектролитными щетками. Показано, что рН-чувствительная щетка отличается от сильной щетки своей способностью реагировать на изменение рН окружающей среды и изменять свою толщину, что влияет на абсорбцию белков.

**Благодарность.** Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант № 23–13–00174.

### Список использованных источников:

1. Zhao, L.; Skwarczynski, M.; Toth, I. Polyelectrolyte-based platforms for the delivery of peptides and proteins. ACS Biomater. Sci. Eng., 5, 4937–4950 (2019).

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. Popova, T. O., Borisov, O. V., Zhulina, E. B. Polyelectrolyte Brushes with Protein-Like Nanocolloids. *Langmuir*, 40(2), 1232-1246 (2024).