

Białka przy powierzchniach

Prof. dr hab. Marek Cieplak

Instytut Fizyki PAN Warszawa

Systematyczne porównywanie siły adsorpcji różnych powierzchni wymagają zbadania zachowania biomolekuł z pewnego ustalonego zbioru odniesienia. Jako takie biomolekuły wybraliśmy: 20 naturalnych aminokwasów, kilkanaście dwupeptydów i małe białko – klatkę tryptofanową. Wykorzystaliśmy pełnoatomowe symulacje dynamiki molekularnej do zbadania oddziaływań tych biomolekuł z ZnS, złotem, celulozą I β , miki i czterema płaszczyznami ZnO. Wyznaczyliśmy potencjały siły średniej i wykazaliśmy, że w istotny sposób zależą one od ciała stałego i od wyboru jego eksponowanej płaszczyzny łupliwości. W wypadku złota zależą one także od wyboru pola siłowego (hydrofobowe, hydrofilowe lub uwzględniające polaryzowalność metalu). Wykazaliśmy, że energie wiązania dwupeptydów i trójpeptydów są mniejsze niż suma energii wiązania ich składników aminokwasowych. Profile gęstości wody i polaryzacji również silnie zależą od powierzchni. Zaobserwowaliśmy, że pierwsza warstwa wody, jaka się tworzy w pobliżu silnie hydrofilowego ZnO odpowiada tak dużej gęstości upakowania, że nawet pojedyncze aminokwasy nie mogą dojść do powierzchni ciała stałego. ZnS jest bardziej hydrofobowe, co prowadzi tylko do nieznacznego profilowania wody w warstwy gęstości. W wypadku ZnS nie wszystkie aminokwasy mogą się związać z powierzchnią. Kiedy się faktycznie wiążą, ich energie wiązania są porównywalne z tymi, jakie znaleźliśmy dla powierzchni ZnO (i do energii wiązań wodorowych w białkach), ale ich specyficzności są zupełnie odmienne. W wypadku hydrofobowego złota, czy lekko hydrofilowej powierzchni celulozy I β , zdarzenia adsorpcji klatki tryptofanowej są sterowane przez przyciąganie najsilniej wiążących aminokwasów. Tak nie dzieje się jednak dla ZnO, ZnS i hydrofilowych modeli złota. Badania kilku białek w pobliżu powierzchni miki, która ma wypadkowy ujemny ładunek powierzchniowy, wskazują na istnienie dwóch rodzajów stanów: zdeformowanych i rozwiniętych. Korzystając z modelu gruboziarnistego, wykazaliśmy istnienie szklistych zachowań warstw białek na granicy pomiędzy wodą i powietrzem.

- [1] A. Starzyk, M. Cieplak, J. Chem. Phys. 135, 235103 (2011);
- [2] G. Nawrocki, M. Cieplak, Phys. Chem. Chem. Phys. 15, 13628-13636 (2013);
- [3] G. Nawrocki, M. Cieplak, J. Chem. Phys. 140, 095101 (2014);
- [4] G. Nawrocki, M. Cieplak, J. Phys. Chem. C 118, 12929-12943 (2014);
- [5] M. Cieplak, D. B. Allen, R. L. Leheny, D. H. Reich, Langmuir 30, 12888-96 (2014).
- [6] G. Nawrocki, P.-A. Cazade, D. Thompson, M. Cieplak, J. Chem. Phys. C (2015)