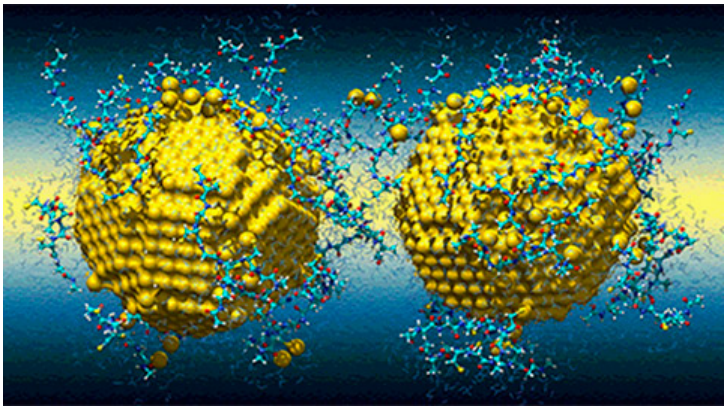
Учёные СФУ выясняли механизм присоединения биомолекул к золоту

Учёные Сибирского федерального университета совместно с коллегами из Италии и Швеции исследовали свойства наночастиц золота, покрытых пептидами — небольшими аминокислотными цепочками.



Такое строение определяет особенности устойчивости, динамики и сборки частиц в стабильные структуры. Полученные данные важны для разработки металлических имплантатов и высокочувствительных наносенсоров. Первая работа опубликована в журнале Nano Research. В своём следующем исследовании учёные сконцентрировались на свойствах наночастиц из нитрида титана — перспективного недорогого материала для создания современных фотонных устройств. Об исследовании учёных написал Индикатор — информационно-сервисный портал, посвящённый науке.

Свойства наноразмерных объектов сильно отличаются от свойств тех веществ, с которыми мы встречаемся в обычной жизни. Например, они могут самоорганизовываться, то есть группироваться в определённом порядке. Понимать механизмы того, как это происходит (как физических, так и химических), нужно для создания новых материалов и устройств. В новой работе учёные исследовали наночастицы из золота с прикреплёнными к их поверхности короткими пептидами. Методы компьютерного моделирования позволили им раскрыть механизмы, недоступные для изучения в ходе традиционных экспериментов.

> *«Мы изучили взаимодействия между поверхностью металлических наночастиц и биомолекулами, такими как аминокислоты, пептиды и белки. Мы использовали метод атомистического компьютерного моделирования динамики объекта, при котором можно различить каждый атом большой системы с высокой точностью»,* — рассказывает один из авторов работы, профессор **Ханс Арвид Огрен**.

Результаты работы на атомном уровне показали все детали, касающиеся механизмов присоединения пептидов к поверхности золотых наночастиц, стабилизации получившейся системы, а также её самосборки. Оказалось, что способные к реакции группы аминокислот (-COOH, -SH, $-NH_2$) могут образовывать химические связи с золотом. Кроме того, между молекулами прикреплённых пептидов есть электростатическое (между заряженными фрагментами) и гидрофобное (между незаряженными фрагментами, стремящимися уйти от контакта с окружающей водой) взаимодействие. Это играет важную роль в образовании структурированных агрегатов. Изменения формы пептидов, распределение зарядов при их взаимодействии — всё это может как способствовать, так и препятствовать формированию устойчивой системы. Само наличие неких объёмных молекул на поверхности наночастиц определяет особенности того, как они взаимодействуют с окружением, в частности, с водным раствором. Так, пептиды защищают их от прямого контакта с водой и с другими наночастицами. Это накладывает определённые ограничения на создание материалов и наноразмерных приборов.

> *«Понимание тонких механизмов взаимодействия наночастиц друг с другом и с*

присоединенными к их поверхности биомолекулами открывает новые перспективы в разработке конструкций для двух основных областей. Во-первых, это более совершенные биосовместимые материалы для металлических имплантатов. Во-вторых, это дизайн гибридных наносенсоров, позволяющих с высокой точностью детектировать даже отдельные молекулы», — прокомментировал работу **Огрен**.

В своей следующей работе учёные сконцентрировались на исследовании свойств наночастиц из нитрида титана (TiN). По сравнению с обычно применяемым в таких случаях золотом наночастицы из нитрида титана и дешевле, и устойчивее к температуре. Это перспективный материал для создания современных фотонных устройств. Более того, внутренние особенности TiN позволяют установить частоту колебания наночастиц, применяемую для большинства современных цифровых микросхем в телекоммуникации.

Добавим, работа выполнена сотрудниками Сибирского федерального университета совместно с коллегами из Института химии органометаллических материалов в Италии, Королевского технологического института в Швеции и Института химико-физических процессов в Италии.

Иллюстрация: динамика и самосборка биофункциональных золотых наночастиц в жидкости. Симуляция молекулярной динамики, автор Ханс Арвид Огрен

Пресс-служба СФУ, 17 июля 2018 г.

© Сибирский федеральный университет. Редакция сайта: +7 (391) 246-98-60, info@sfu-kras.ru.

Адрес страницы: https://news.sfu-kras.ru/node/20576