

Присоединение белка HIF-1 α к COOH-N-МУНТ: влияние локальной кривизны поверхности

Сапежинская Т.А.¹, Бобенко Н.Г.¹, Шунаев В.В.², Глухова О.Е.^{2,3}, Колесниченко П.А.^{1,2}

litanyaalex@ispms.ru

¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

² Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

³ Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова, Москва, Россия

Эффективность наноуглеродных материалов как носителей биомолекул определяется прочностью их связывания с поверхностью и кинетикой последующего высвобождения. Одним из факторов, способных влиять на эти параметры, является локальная кривизна графенового слоя углеродных наноструктур [1]. В настоящей работе исследовано влияние локальной кривизны поверхности COOH-функционализированных азотсодержащих многостенных углеродных нанотрубок (COOH-N-МУНТ) на присоединение белка HIF-1 α .

Анализ ТЕМ-изображений COOH-N-МУНТ [2] показал наличие участков положительной (выпуклой) и отрицательной (вогнутой) кривизны. Диапазон радиусов локальной кривизны составляет $|R| = 0.7\text{--}5$ нм, среднее значение 2.5 нм. На основе экспериментальных данных построены атомистические модели локальных фрагментов поверхности (~200 атомов), содержащие карбоксильные функциональные группы (4 ат.% O), атомы азота замещения, карбонильный кислород и дефекты Стоуна-Уэльса. Формирование моделей с различной кривизной, оптимизация атомной структуры и моделирование взаимодействия белка HIF-1 α с поверхностью нанотрубки выполнены методом SCC DFTB. Для полученных конфигураций рассчитаны энергии связи и величины активационного барьера присоединения [2].

Показано, что значения энергии связи для исследованного диапазона радиусов кривизны близки для участков положительной и отрицательной кривизны и варьируются в пределах $-0.47\text{--}-0.35$ эВ. В то же время величина активационного барьера определяется знаком и величиной радиуса кривизны и для вогнутых участков составляет $\sim 0.05\text{--}0.15$ эВ, тогда как для выпуклых – $\sim 0.3\text{--}0.35$ эВ. Таким образом, при сопоставимых энергиях связи присоединение белка HIF-1 α энергетически более благоприятно на вогнутых участках COOH-N-МУНТ, что связано с меньшей величиной активационного барьера.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-00377, <https://rscf.ru/project/25-22-00377/>.

Ссылки

1. Z. Gu, Z. Yang, Y. Chong, C. Ge, J.K. Weber, D.R. Bell, and R. Zhou, Sci. Rep. (2015) 5, 10886.
2. V.V. Shunaev, N.G. Bobenko, P.M. Korusenko, V.E. Egorushkin, and O.E. Glukhova, Int. J. Mol. Sci. (2023) 24, 1296.