

Силовая спектроскопия макромолекул
Темкина Н.В., Филонов А.С., Яминский И.В.
студентка

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

temkina@polly.phys.msu.ru

Атомно-силовая микроскопия является широко применяемым методом исследования топографии поверхности с субнанометровым пространственным разрешением, методом изучения локальных сил трения, адгезии, упругих и вязких свойств поверхности. Кроме того, атомно-силовой микроскоп может быть использован для изучения свойств единичных макромолекул при растяжении.

Подобный эксперимент проводится следующим образом: кантилевер и поверхность подложки модифицируются так, чтобы при помещении в раствор с исследуемым веществом образовывались устойчивые связи как с поверхностью, так и с кантилевером. После этого строится зависимость силы взаимодействия между кантилевером и молекулой (F) от перемещения по вертикали пьезосканера (z) при подводе и отводе от поверхности – снимается силовая кривая. Локальные минимумы на кривой отвода соответствуют конформационным переходам внутри молекулы, возникающим в результате ее растяжения.

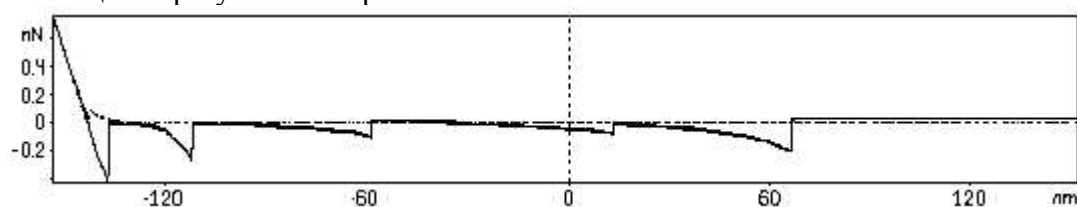


Рис.1. Зависимость силы, действующей на молекулу со стороны зонда, от ее растяжения.

При правильном анализе подобные исследования могут стать мощным инструментом для изучения структуры и упругих свойств сложных макромолекул.

В данной работе для анализа результатов была выбрана персистентная модель полимерной цепи, в рамках которой верна следующая интерполяционная формула [1]:

$$f = \frac{k_B T}{L_p} \left(\frac{1}{4 \left(1 - \frac{z}{L}\right)^2} - \frac{1}{4} + \frac{z}{L} \right),$$

где персистентная длина молекулы L_p и контурная длина L - параметры, подбирая которые наилучшим образом, можно аппроксимировать участки силовой кривой, и тем самым, вычислить интересующие нас величины.

Для расчета описанных выше величин в программе Фемтоскан Онлайн был разработан специальный модуль, дающий возможность последовательного выполнения необходимых для аппроксимации экспериментальной кривой операций. Выделение участков, на которых поведение кривой может быть описано персистентной моделью с постоянными параметрами, производится путем поиска локальных минимумов. На выделенных участках осуществляется градиентный поиск минимума функционала путем вариации параметров L_p и L . Была проведена обработка серии силовых кривых для α -синуклеина, предоставленной медицинским центром университета Небраски. Расчеты дали среднюю величину для персистентной длины около 150 пм.

Разработанный программный модуль может быть эффективно использован при изучении явления перехода к неправильной упаковке белков, вызывающего серьезные неврологические заболевания.

1. C. Bouchiat, M.D. Wang, J.-F. Allemand, T.Strick, S.M. Block, V. Croquette Estimating the Persistence Length of a Worm-Like Chain Molecule from Force-Extension Measurements.