

# **Biomolekulák nanomechanikája**

## **A biomolekuláris rugalmasság alapjai**

**Mártonfalvi Zsolt**



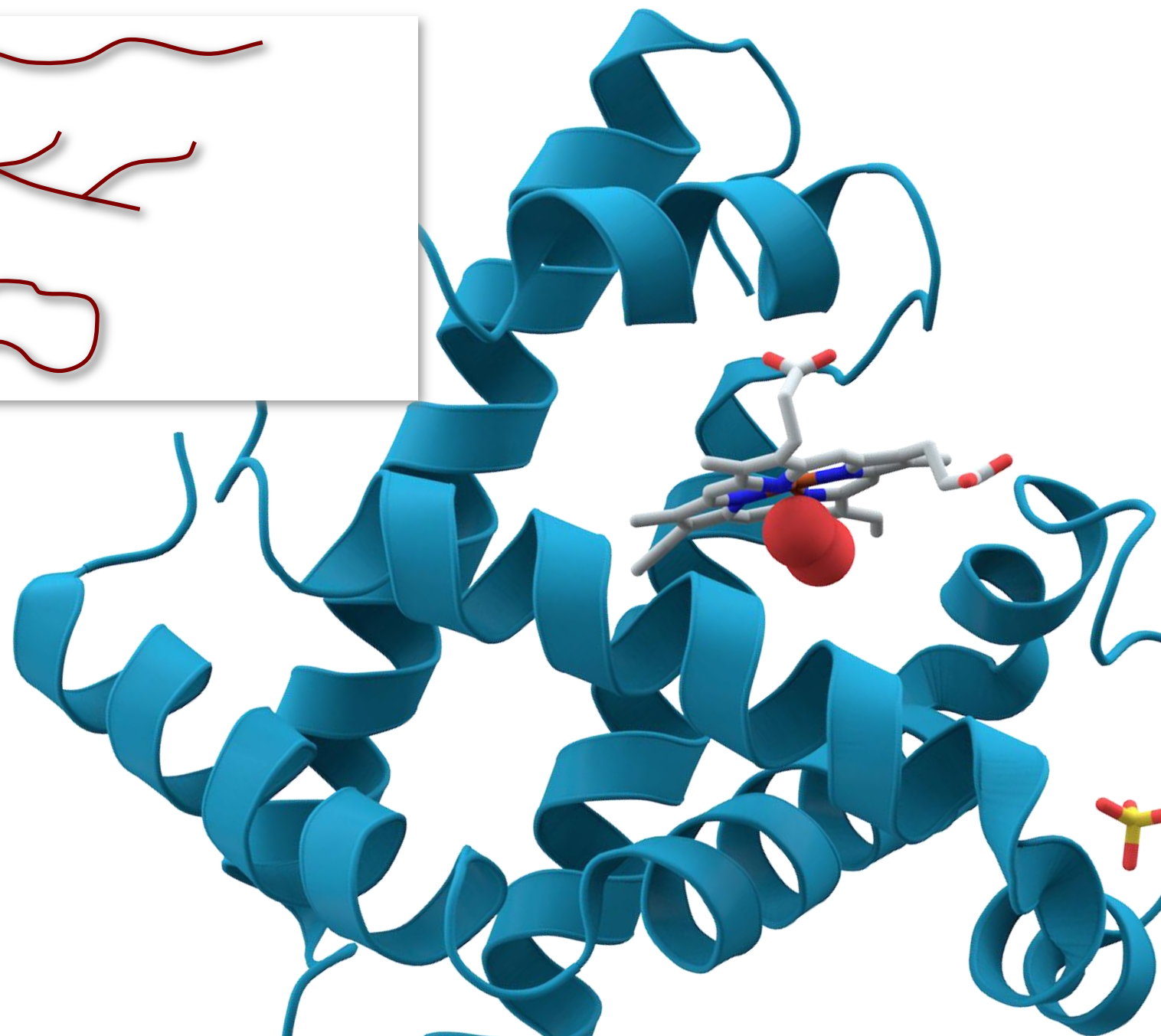
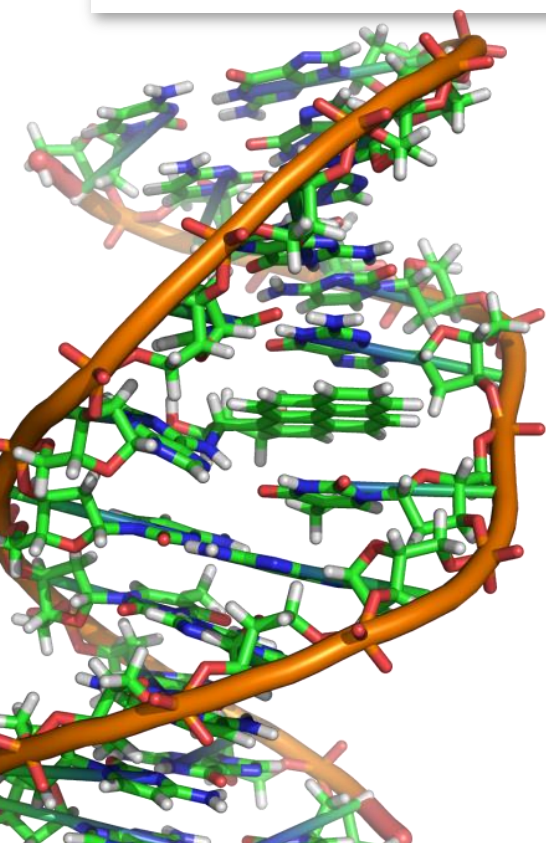
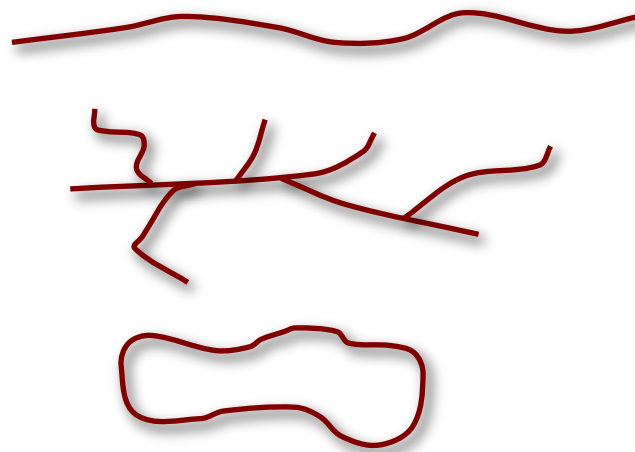
**Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet**  
**Semmelweis Egyetem**  
**Budapest**

# Biomolekulák mint polimerek

A biomolekulák polimerek.

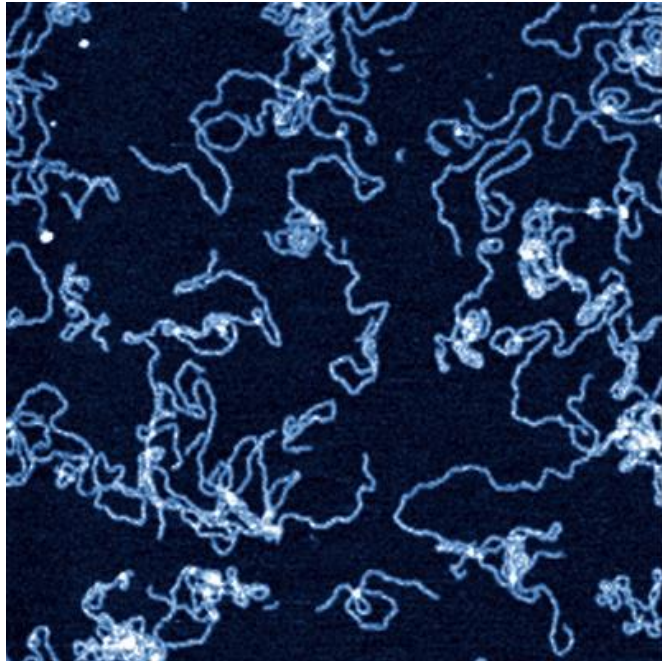
Közös bennük:      Lineáris elsődleges szerkezet (fehérje, DNS)  
                         Monomerek között erős kötések (kovalens)  
                         A lánc távoli részei között gyengébb másodlagos kötések

1. Lineáris  
*DNS, fehérje, cellulóz*
2. Elágazó  
*glikogén*
3. Cirkuláris  
*mt DNS*

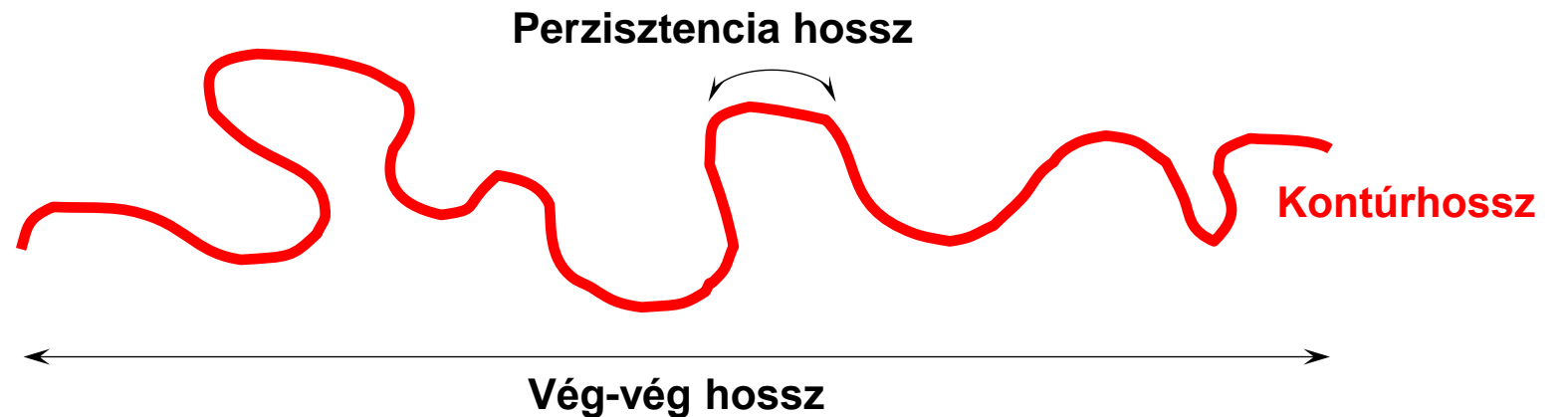


# Milyen alakúak a biopolimerek?

## Biopolimerek alakját leíró paraméterek



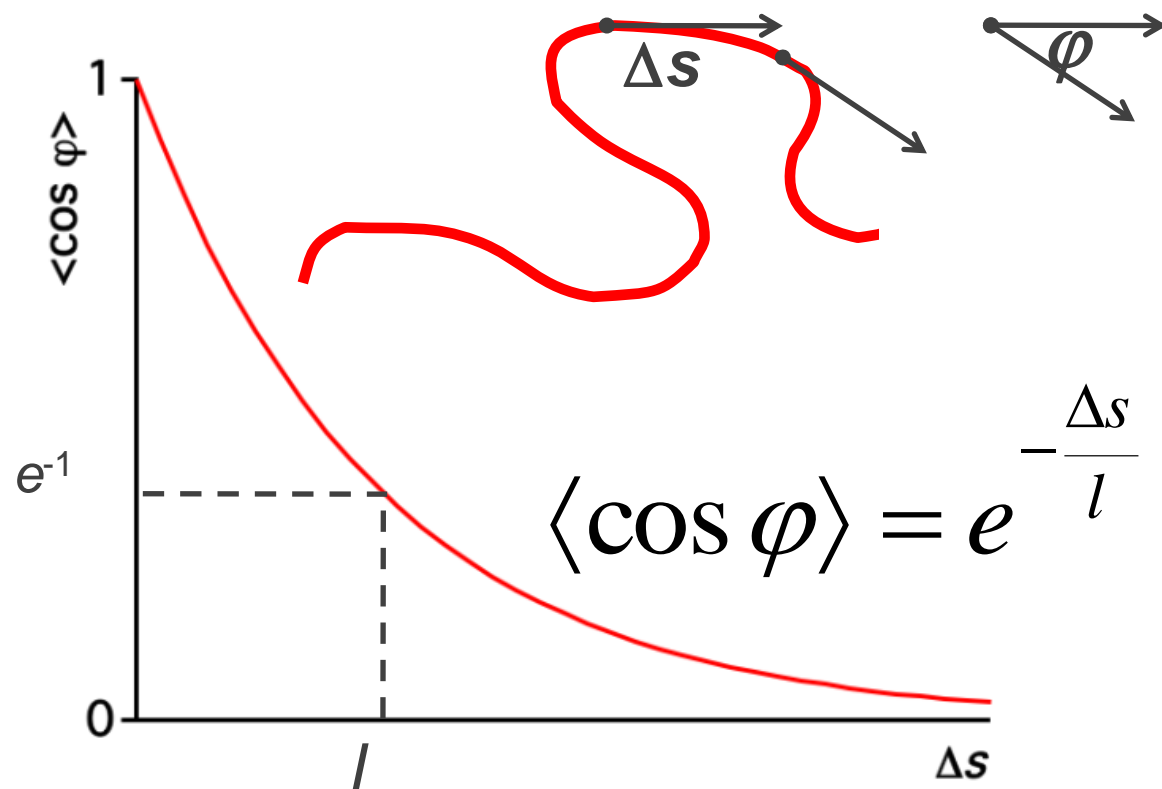
Kettős szálú DNS



**Kontúrhossz (L):** A lánc teljes hossza

**Vég-vég hossz (R):** A lánc két végpontja között mért távolság.

**Perzisztenciahossz (l) :** jellemzi a láncirányultság állandóságát.



*A rövidebb perzisztenciahosszal rendelkező polimerek rugalmasabbak.*



# Biopolimerek osztályozása hajlékonyságuk alapján

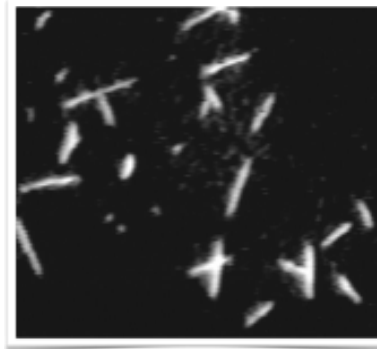
$l$  = perzisztenciahossz

$L$  = kontúrhossz

Merev

$$l \gg L$$

Mikrotubulus



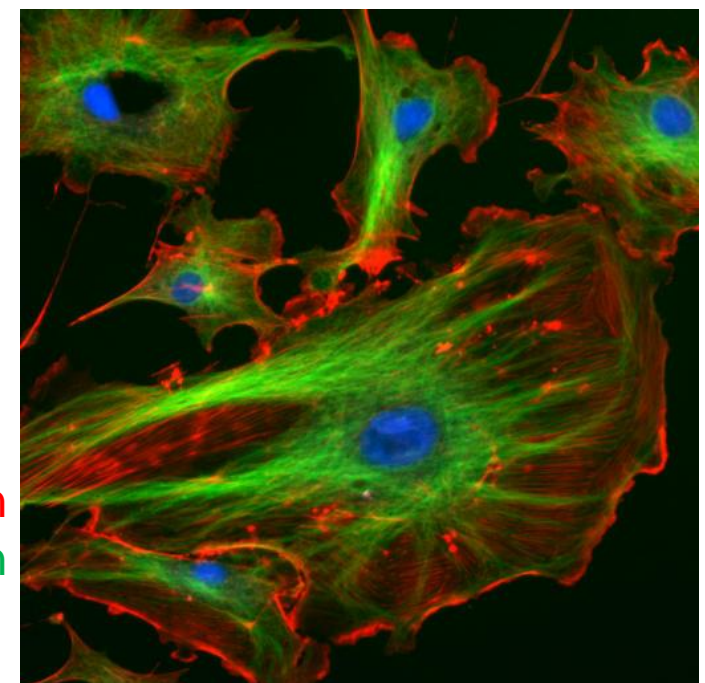
Szemiflexibilis

$$l \approx L$$

Mikrofilamentum



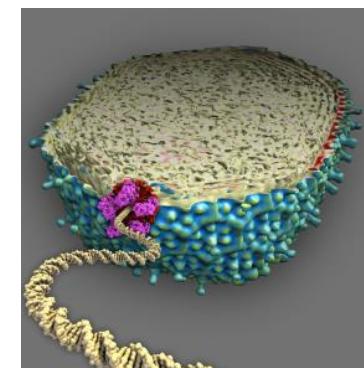
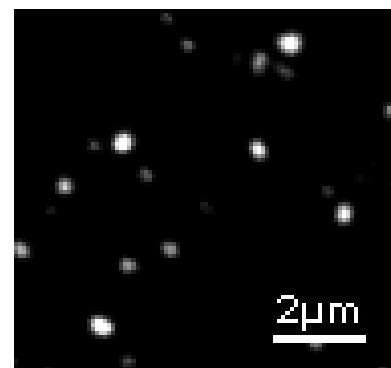
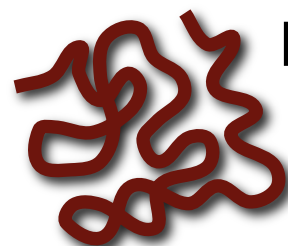
aktin  
tubulin



Hajlékony

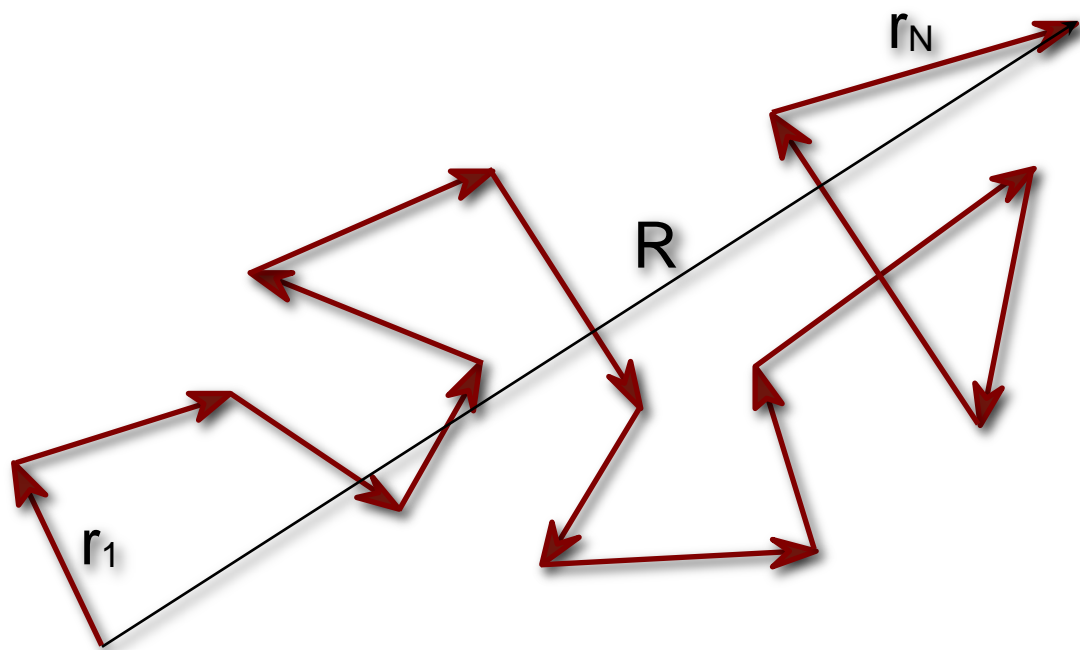
$$l \ll L$$

DNS



# A biopolimerek alakja a „bolyongó mozgás” segítségével leírható

„Random” -bolyongó- mozgás



$R$  = vég-vég távolság

$r_i$  = elemi vektor



“Négyzetgyök összefüggés”:

$$\langle R^2 \rangle = Nl^2 = Ll$$

$\langle R^2 \rangle$  = átlagos négyzetes vég-vég távolság

$N$  = elemi vektorok száma

$l$  = átlagos elemi vektor hossza (perzisztenciahossz)

$Nl = L$  = kontúrhossz

$$\langle R \rangle = \sqrt{lL}$$

*Entrópikus polimer esetén a négyszer hosszabb lánc átlagos vég-vég távolsága csak kétszer hosszabb.*

*Rövidebb perzisztenciahossz ( $l$ ) esetén a lánc hajlékonyabb ezért jobban feltekeredik, vég-vég hossza rövidebb.*

*Biofizika 2. félév: Diffúzió  $\rightarrow \langle x \rangle = \sqrt{2Dt}$*

# Rugalmasak-e a biopolimerek?

*Igen, de nem érvényes Hooke törvénye. Rugalmasságuk nem lineáris.*

## Entrópikus rugalmasság

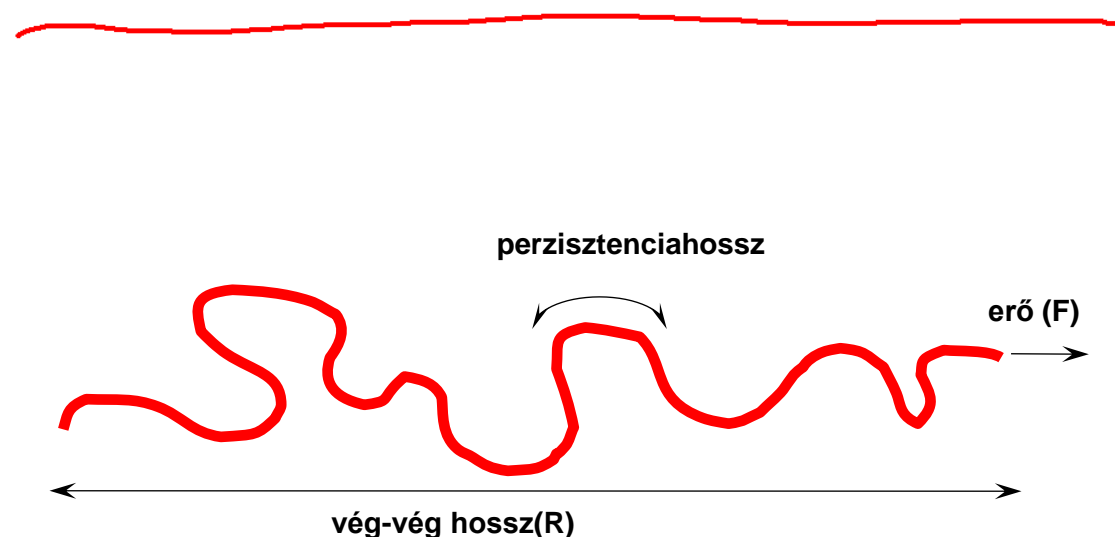
Hőmérsékleti energia ( $k_B T$ ) a láncban hajlítómozgásokat gerjeszt



A lánc rendezetlensége (entrópiája) növekszik.



A lánc rövidül



## A megrövidült lánc erővel kinyújtható

$$F \sim \frac{k_B T}{l} \cdot \frac{R}{L} + \left( \frac{R}{L} \right)^a$$

$F$  = erő

$l$  = perzisztenciahossz

$k_B$  = Boltzmann állandó

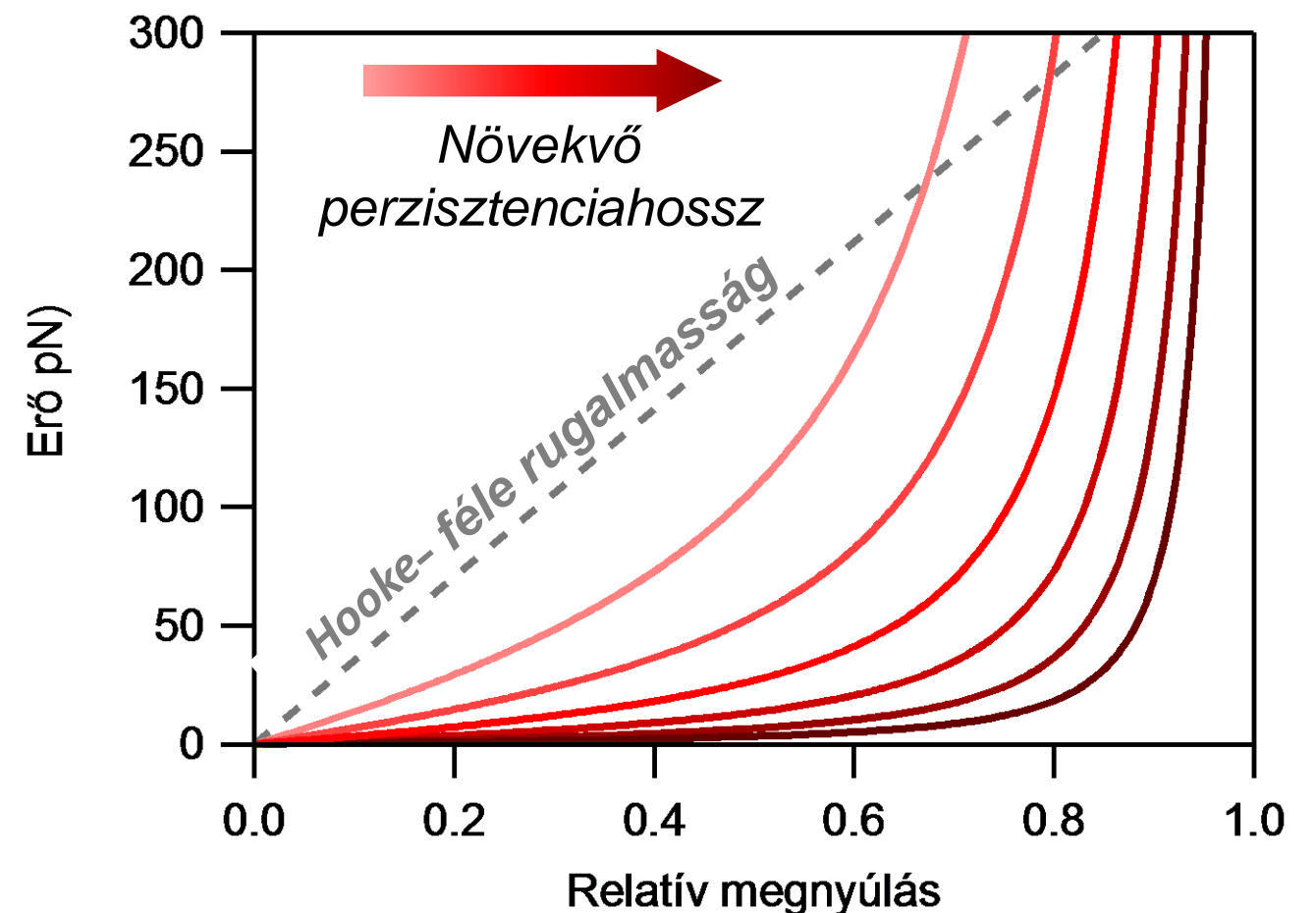
$T$  = abszolút hőmérséklet

$L$  = kontúrhossz

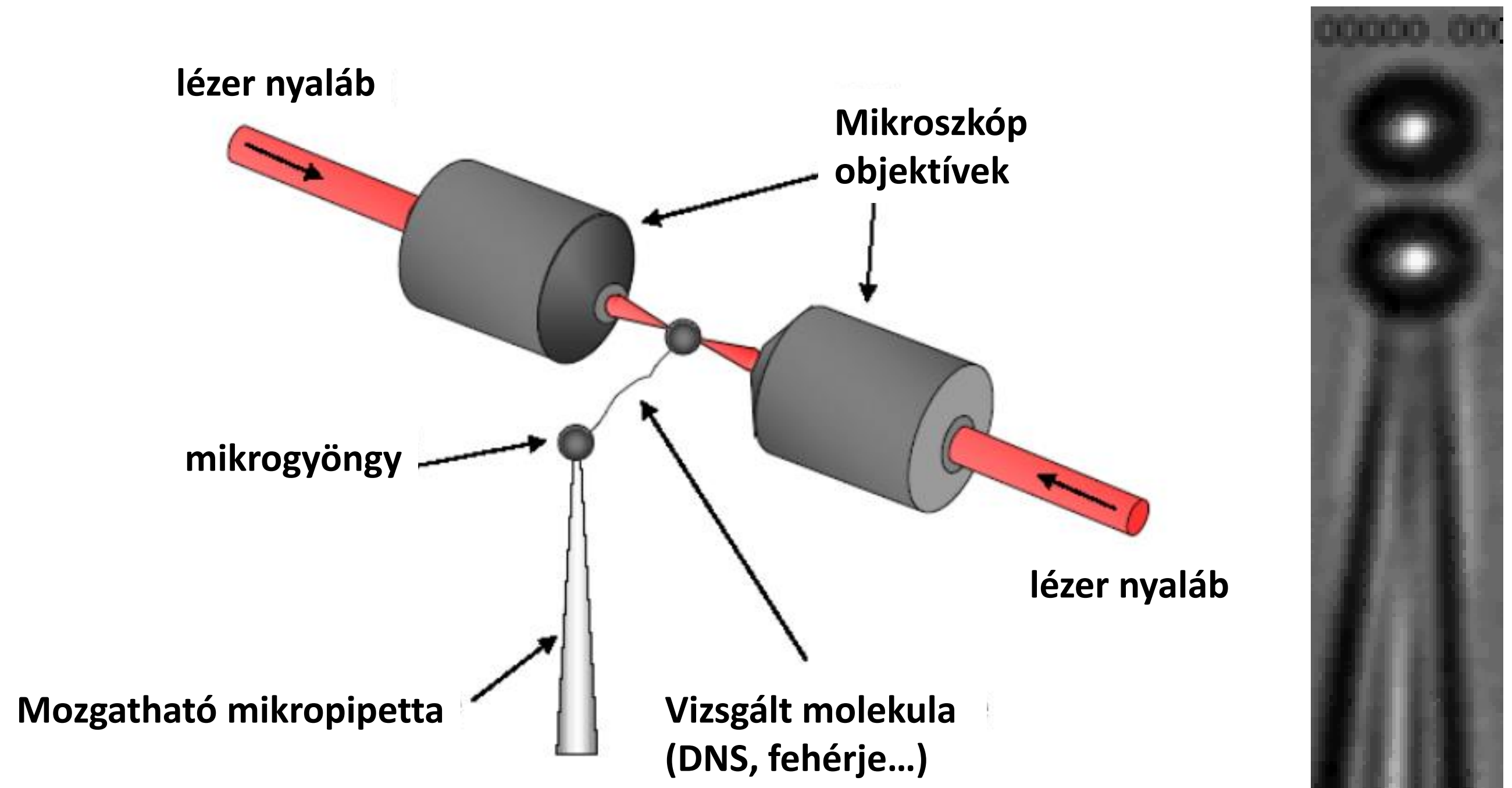
$R$  = vég-vég hossz

$R/L$  = relatív megnyúlás

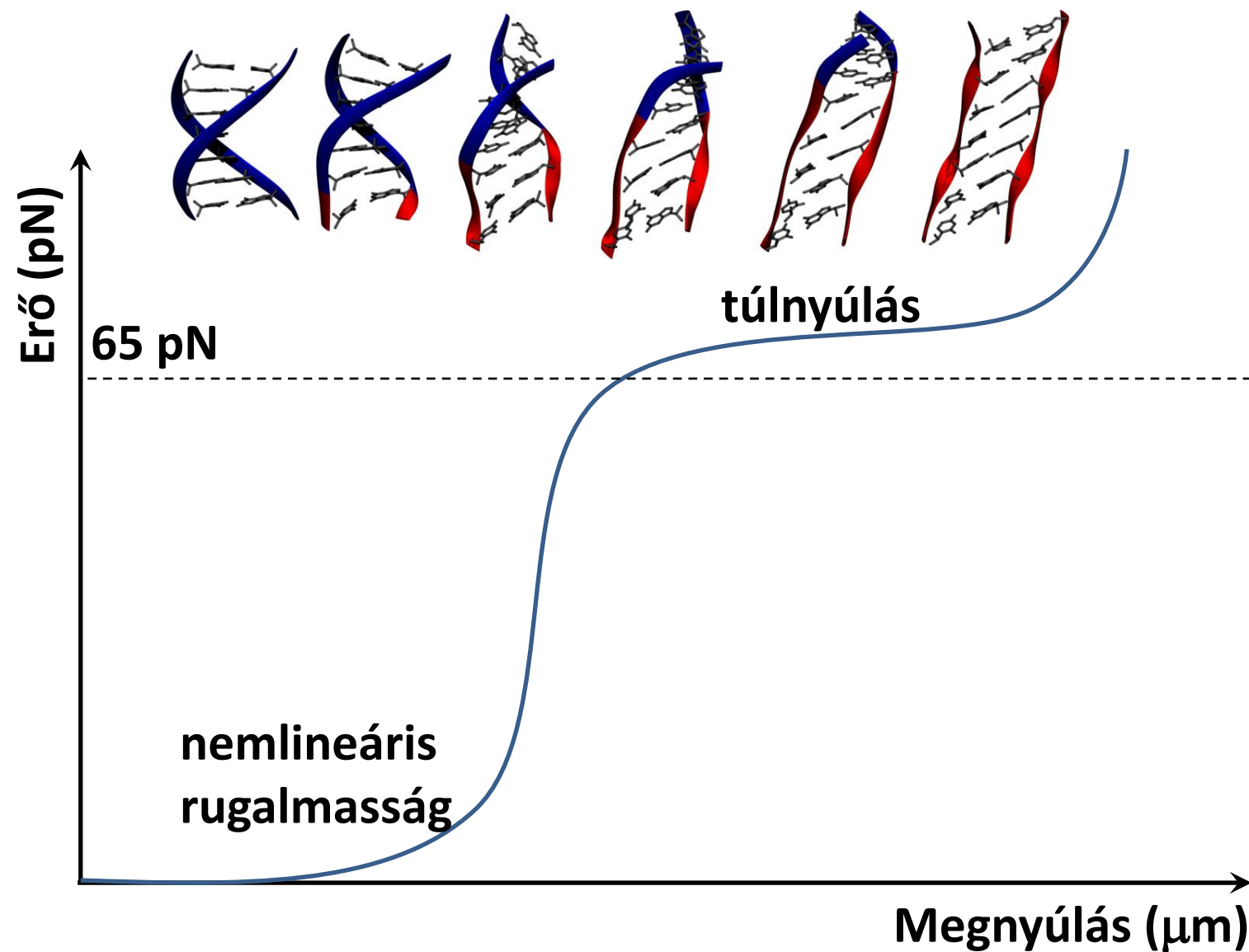
## Nemlineáris erőválasz



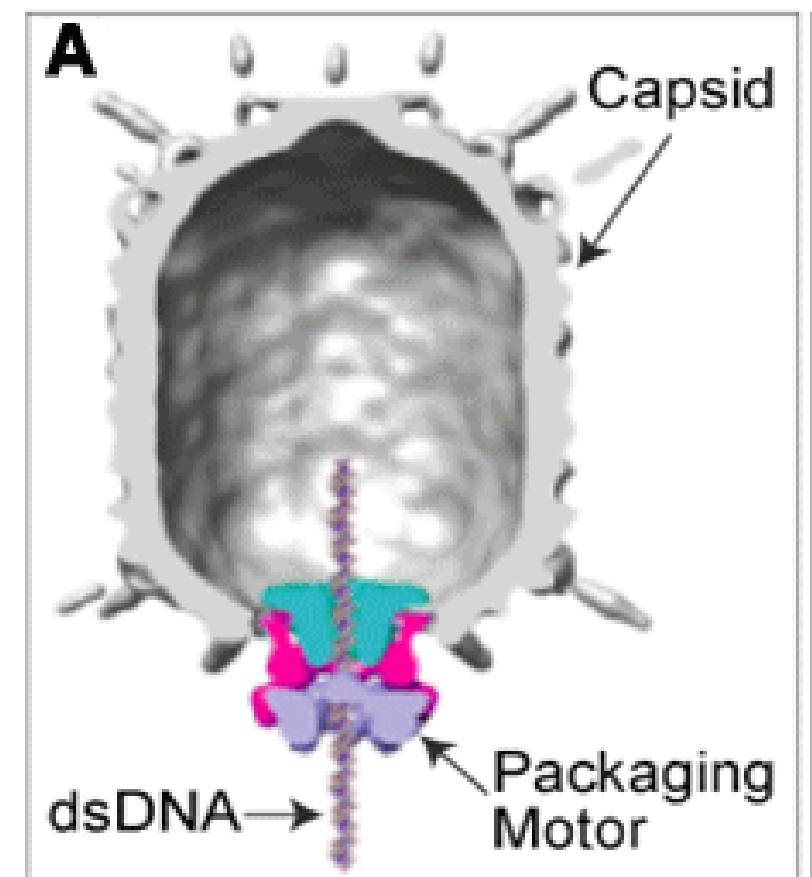
# Lehet egyedi molekulákat nyújtani? *a lézercsipesz*



# Kettős szálú DNS nyújtása lézercsipesszel



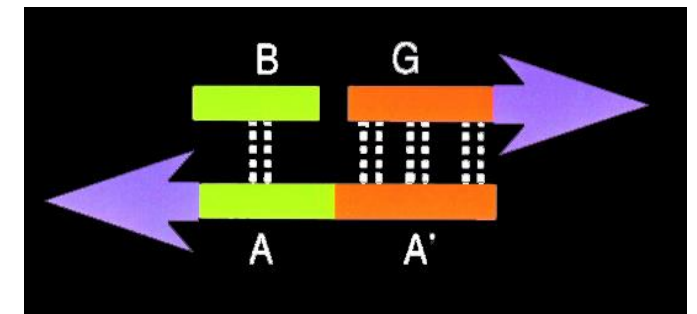
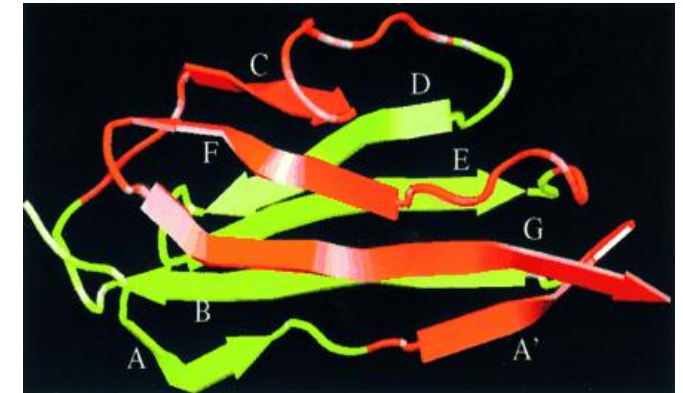
Bakteriofág DNS „pakoló” motorja



$F = 55 \text{ pN}$



# Globuláris fehérje kitekerése erővel

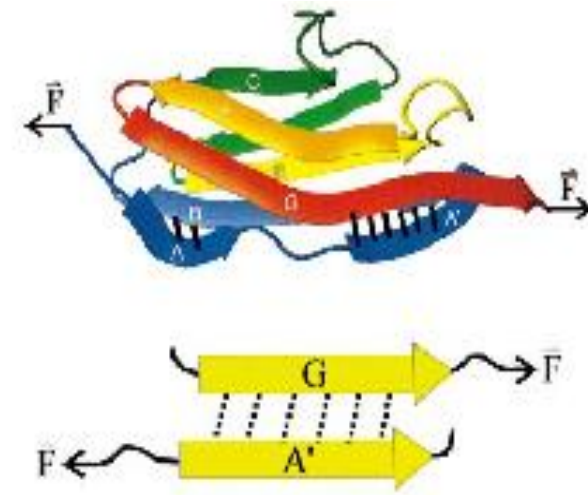
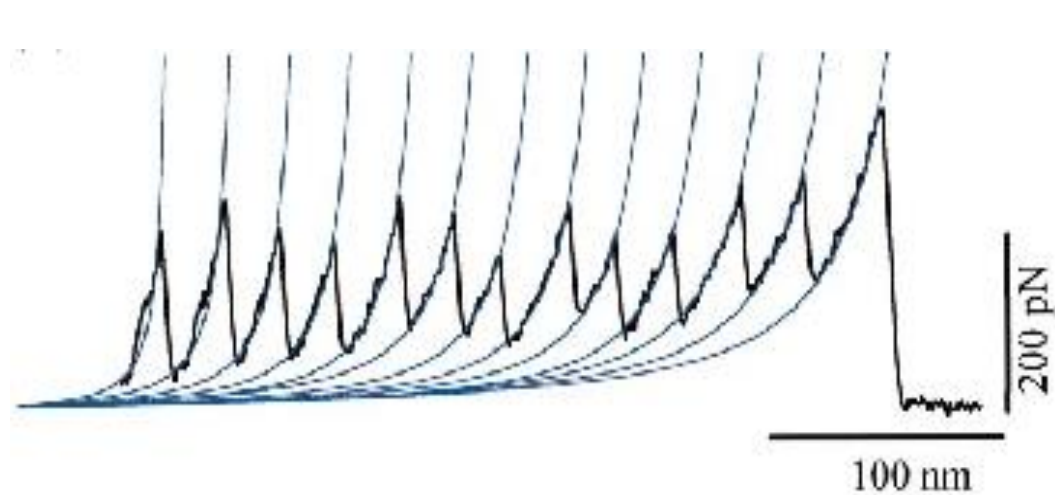


A mechanikai stabilitás alapja:

H-hidak a domén első és utolsó  $\beta$ -láncai között

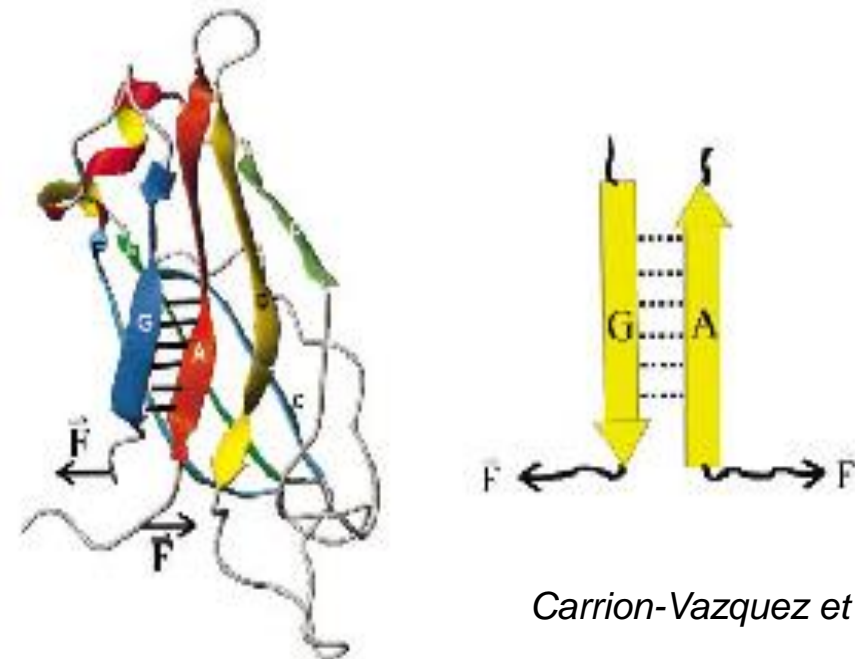
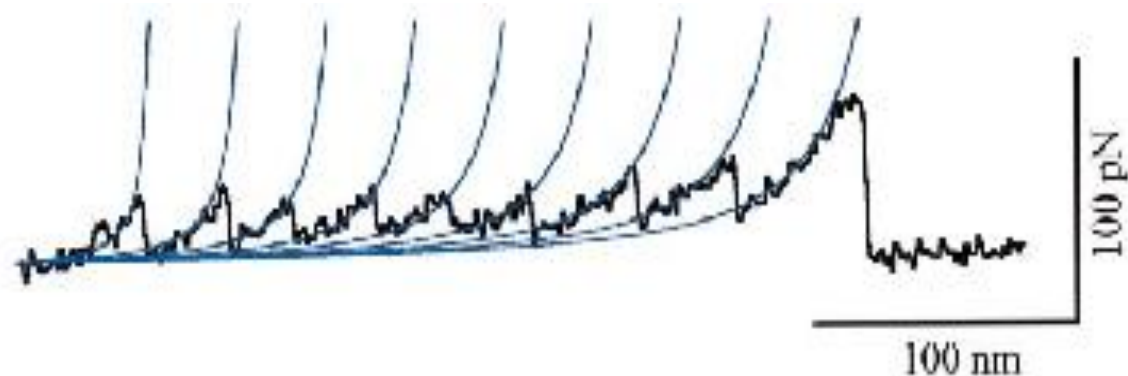
# A harmadlagos szerkezet megszabja egy fehérje mechanikai stabilitását

H-hiada merőlegesen az erőhatás irányára : Nagyfokú stabilitás  
A kitekeredéshez szükséges erő nagyobb mint 200 pN



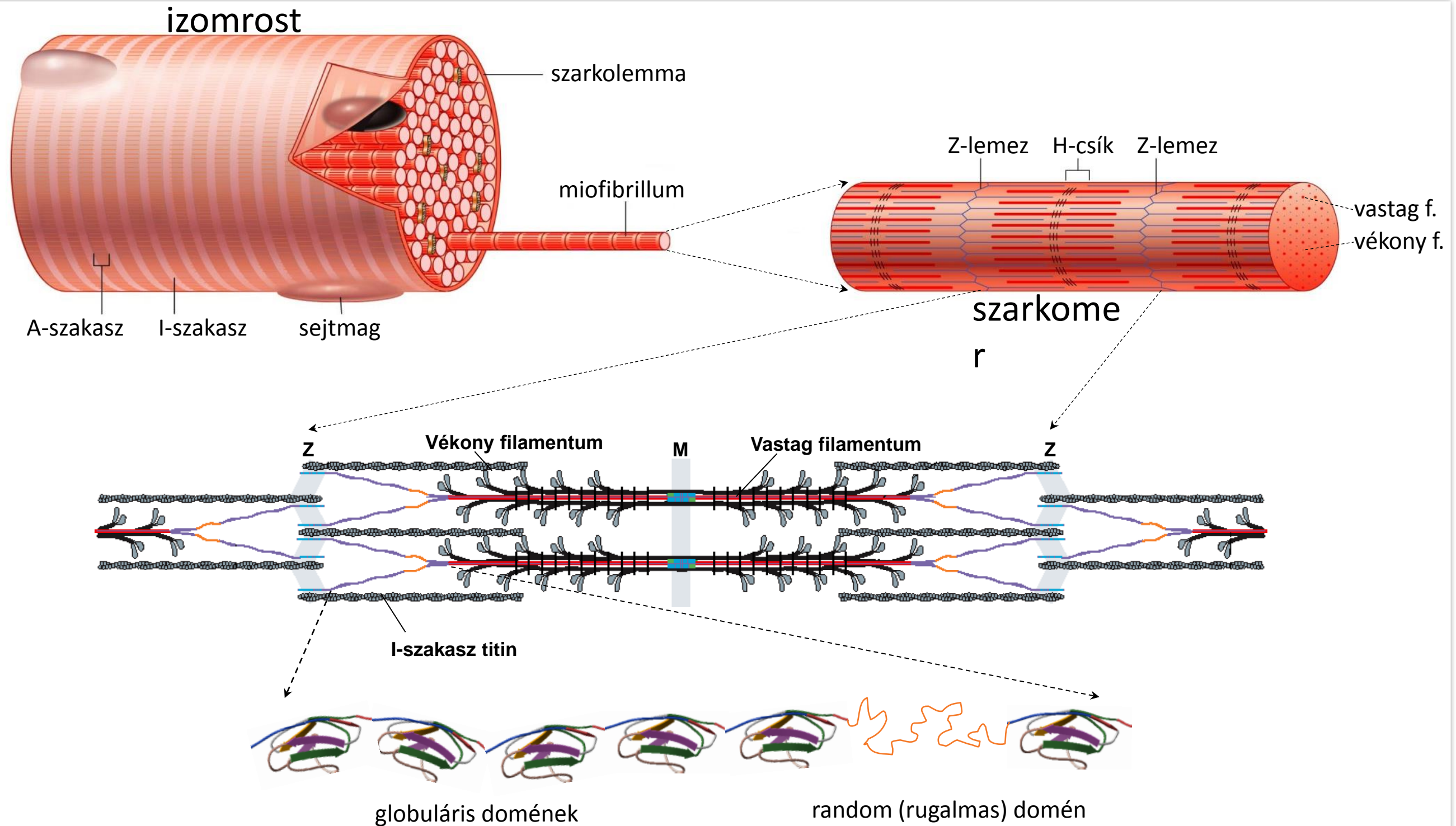
*Carrion-Vazquez et al. 2000*

H-hiada párhuzamosak az erőhatás irányával: Kevésbé stabil  
A kitekeredés már 100 pN alatti erőknél végbemegy



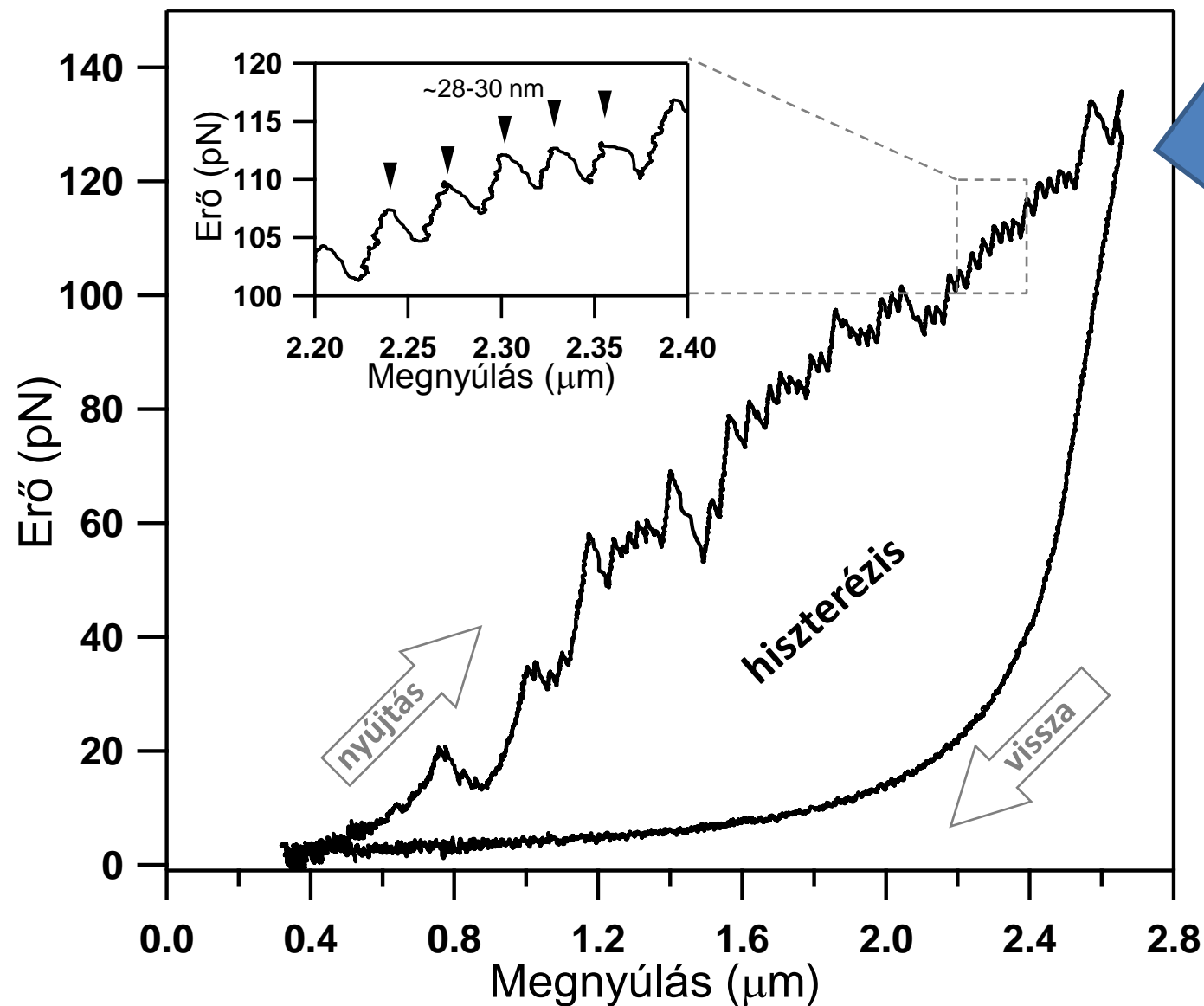
*Carrion-Vazquez et al. 2000*

# Titin: a szarkomer rugalmas filamentuma



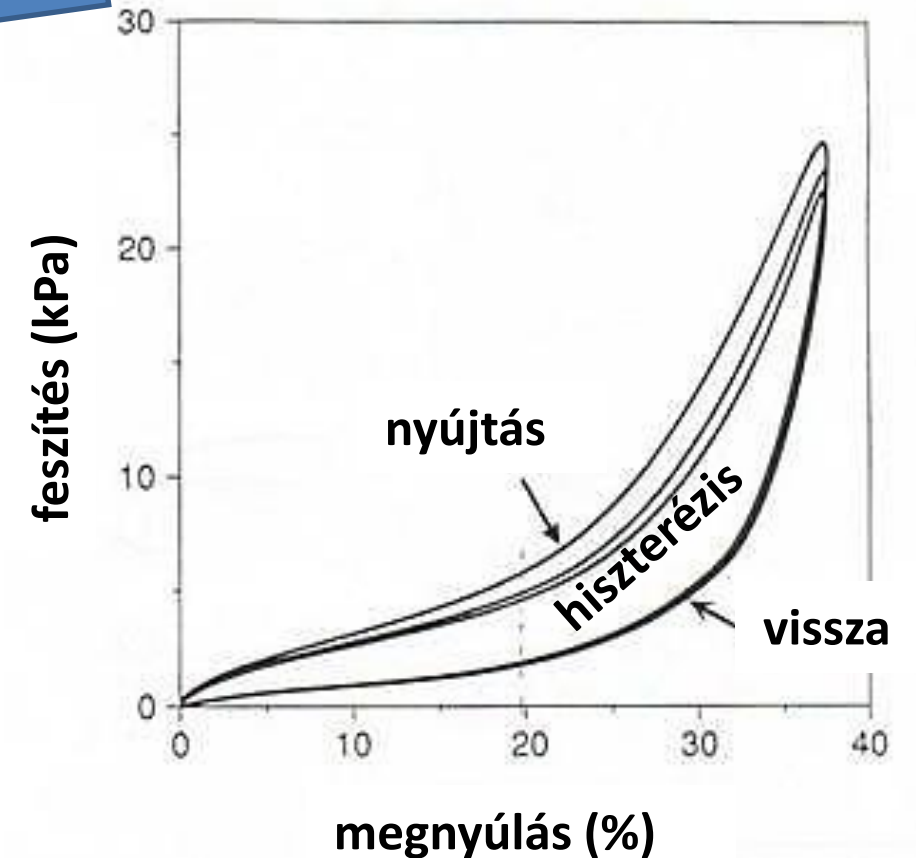
# A titinmolekula az izom passzív rugalmasságának fő meghatározója

## Egyedi titin molekula



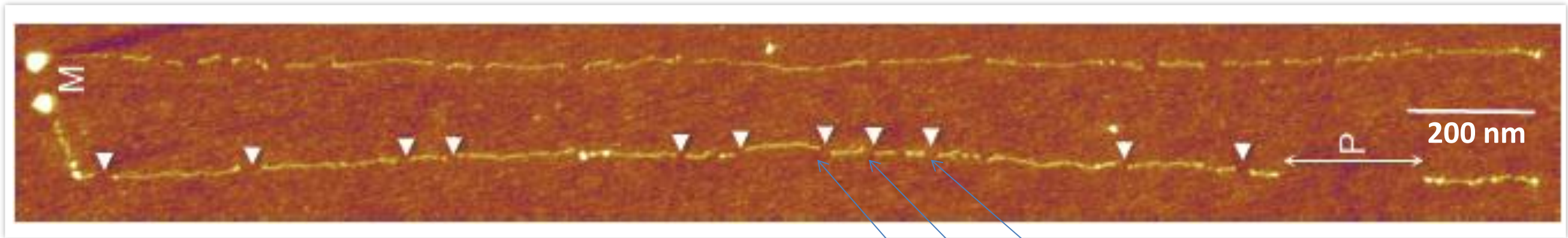
**Molekuláktól a szövetig**  
*Az izom rugalmassága a titin molekuláris rugalmasságával magyarázható*

## Izomrost

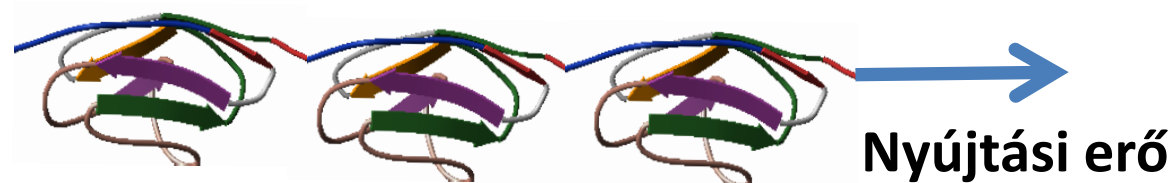
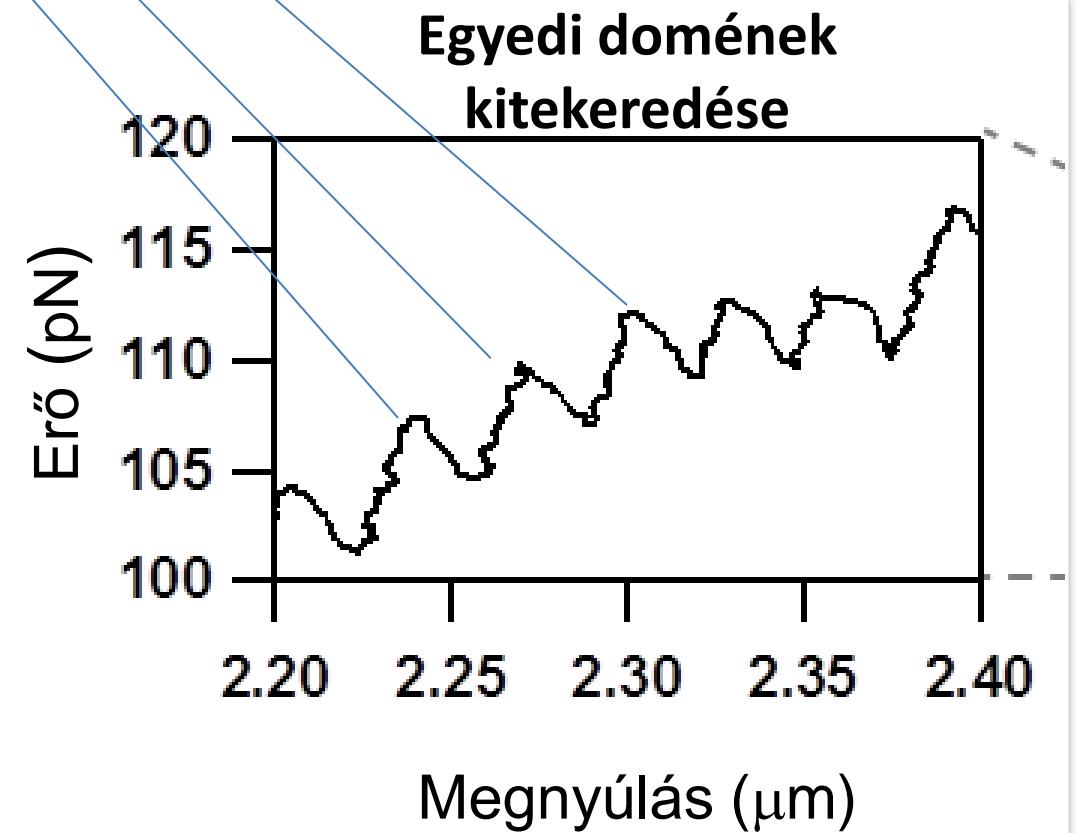
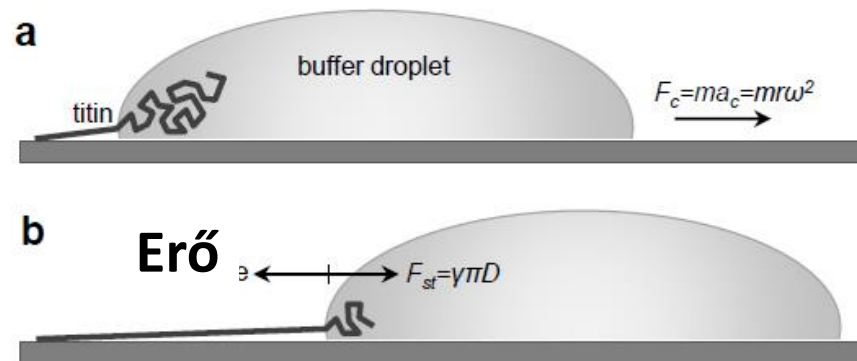




# Erő hatására hogyan változik a titin szerkezete?



**Molekula nyújtás visszahúzóó  
folyadék meniszkusszal**



# Lehet-e csomót köti egy DNS molekulára?

*Igen! A DNS rugalmas...*

