

## Biomolekulák nanomechanikája A biomolekuláris rugalmasság alapjai

Mártonfalvi Zsolt



Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet  
Semmelweis Egyetem  
Budapest

## Biomolekulák mint polimerek

A biomolekulák polimerek.

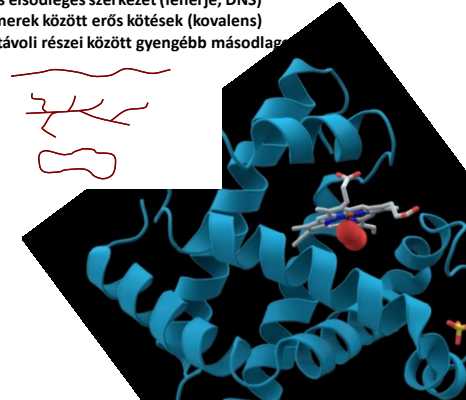
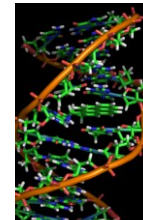
Közös bennük:

Lineáris elsődleges szerkezet (fehérje, DNS)

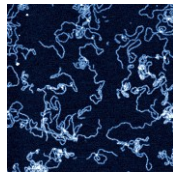
Monomerek között erős kötések (kovalens)

A lánc távoli részei között gyengébb másodlagos

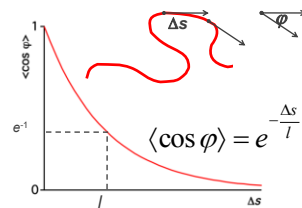
1. Lineáris  
DNS, fehérje, cellulóz
2. Elágazó  
glikogén
3. Cirkuláris  
mt DNS



## Milyen alakúak a biopolimerek?



Kettős szálú DNS



Biopolimerek alakját leíró paraméterek



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

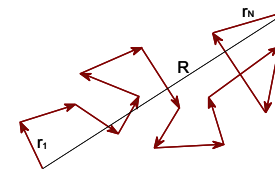
**Vég-vég hossz (R):** A lánc két végpontja között mért távolság.

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

A rövidebb perzisztenciahosszal rendelkező polimerek rugalmasabbak.

## 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

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

Entropikus polimer esetén a négyszer hosszabb lánc

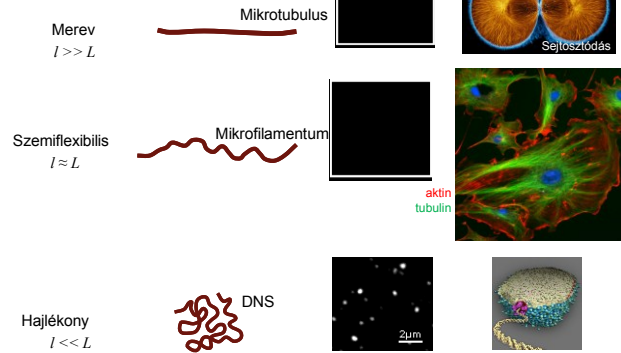
átlagos vég-vég távolsága csak kétszer hosszabb.

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

Biofizika 2. feladv. Diffúzió  $\Rightarrow \langle x \rangle = \sqrt{2Dt}$

## Biopolimerek osztályozása hajlékonyságuk alapján

$l$  = perzisztenciahossz  
 $L$  = kontúrhossz



## 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

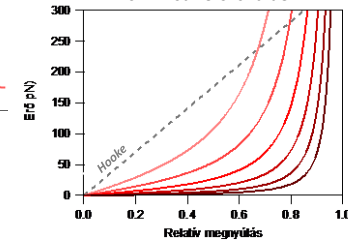


### A megrövidült lánc erővel kinyújtható

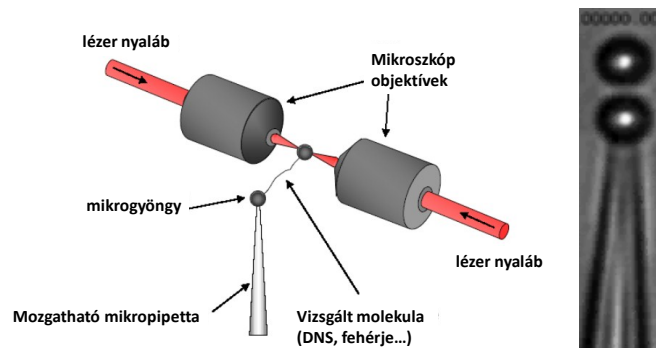
$$F \sim \frac{k_B T}{l} \cdot \frac{R}{L} + \left(\frac{R}{L}\right)^a$$

$F$  = erő  
 $l$  = perzisztenciahossz  
 $k_B$  = Boltzmann állandó  
 $T$  = abszolút hőmérséklet  
 $L$  = kontúrhossz  
 $R$  = vég-vég hossz  
 $R/L$  = relatív megnyúlás

### Nemlineáris erőválasz

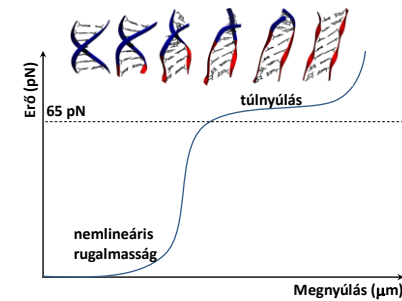


## Lehet egyedi molekulákat nyújtani? a lézercsipesz

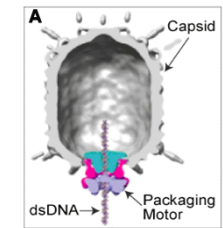


<http://glass.phys.uniroma1.it/dileonardo/Applet.php?applet=TrapForcesApplet>

## Kettős szálú DNS nyújtása lézercsipeszsel

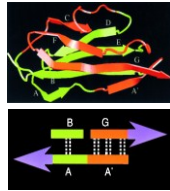


### Bakteriófág DNS „pakoló” motorja



$F = 55$  pN

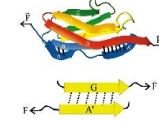
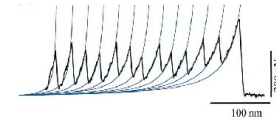
## Globuláris fehérje kitekerése erővel



A mechanikai stabilitás alapja:  
H-hidak a domén első és utolsó  $\beta$ -láncai között

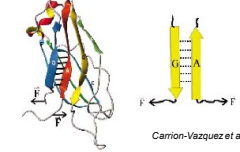
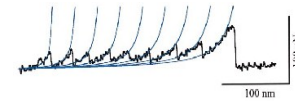
## A harmadlagos szerkezet megszabja egy fehérje mechanikai stabilitását

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



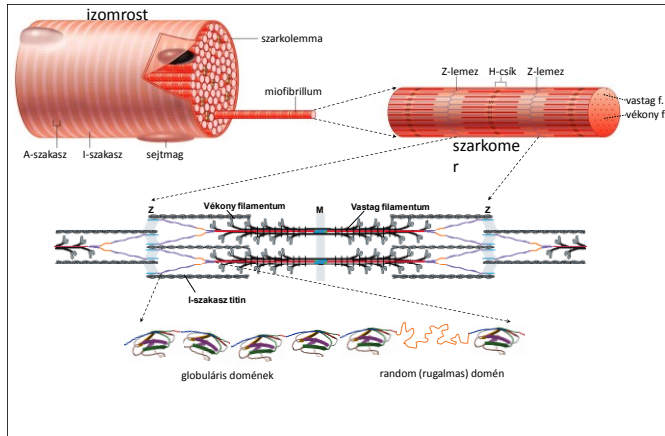
Carrion-Vazquez et al. 2000

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

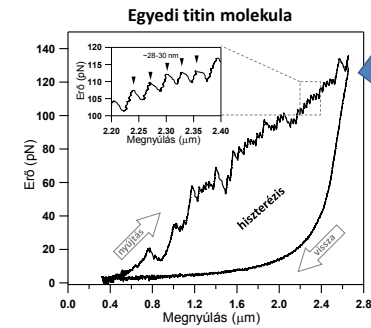


Carrion-Vazquez et al. 2000

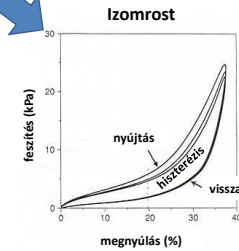
## Titin: a szarkomer rugalmas filamentuma



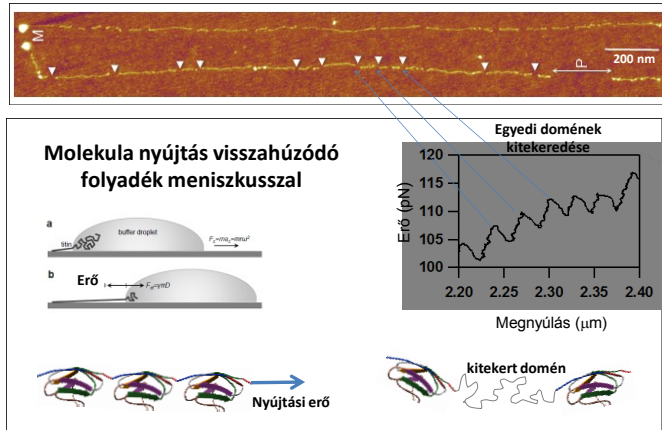
## A titinmolekula az izom passzív rugalmasságának fő meghatározója



Molekuláktól a szövetig  
Az izom rugalmassága a titin molekuláris rugalmasságával magyarázható



## Erő hatására hogyan változik a titin szerkezete?



## Lehet-e csomót köti egy DNS molekulára?

Igen! A DNS rugalmas...

