Abstrakt:

Slabý polyamfolyt je polymer obsahující jak kyselé tak i bazické skupiny na jednom řetězci. Ve vodných roztocích tyto skupiny disociují v určitém rozmezí pH. S rostoucím pH tak může změna disociace jednotlivých skupin vést ke změně znaménka celkového náboje polyamfolytu z pozitivního na negativní. Schopnost slabých amfolytů regulovat svůj náboj v reakci na změnám pH je důležitá v různých aplikacích i v biologických systémech. I když výzkumu slabých polyamfolytů už bylo věnováno značné úsilí, pochopení některých jejich vlastností dosud není zcela uspokojivé.

V této práci jsem systematicky studoval regulaci náboje modelových slabých polyamfolytů, konkrétně krátkých peptidů v roztocích, a při interakci s polyelektrolyty. V návaznosti na to jsem dále studoval regulace náboje polyzwitterionů. Všechny tyto studie byly provedeny pomocí jednoduchých zhrubených (coarse-grained) modelů. Simulace těchto modelů jsem prováděl pomocí Langevinovské dynamiky v constant-pH souboru, což mi umožnilo zahrnout vliv acidobazické rovnováhy kyselých a zásaditých skupin. Pomocí našich simulací jsme dokázali vysvětlit jak elektrostatické interakce mezi ionizovatelnými kyselými a bazickými funkčními skupinami v peptidech a polyzwitterionech ovlivňují jejich reakci na změny pH. Porovnáním výsledků našich simulací s ideálním modelem jsme ukázali a vysvětlili odchylky od ideálního chování. Porovnáním těch samých simulací se experimenty provedenými našimi kolegy jsme ukázali, že zhrubené modely mohou kvantitativně předpovědět regulaci náboje v různých peptidech a polyzwitteriontech. Taky se ale ukázalo, že náš model naráží na svoje limity a nedokáže správně předpovědět náboj polyzwitteriontů v případech, kdy dochází k významným specifickým interakcím. V kontextu peptidů interagujících s polyelektrolyty naše simulace ukázaly, za jakých okolností regulace náboje umožňuje adsorpci peptidů na polyelektrolyty na tzv. "nesprávné" straně izoelektrického bodu, t.j. když celkový náboj peptidu má stejné znaménko jako u polyelektrolytu. Na základě těchto pozorovování by naše modely mohly být použity k pochopení složité vazby mezi ionizací a konformací flexibilních polyamfolytů, včetně syntetických polymerů, biomimetických materiálů a biomolekul, jejichž náboj může být regulován změnami pH.