

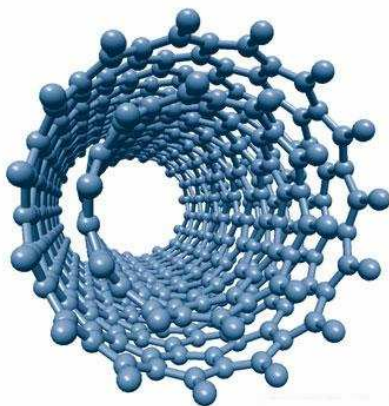
---

---

***ОРГАНИЧЕСКИЕ И ГИБРИДНЫЕ  
НАНОМАТЕРИАЛЫ***

*VIII Всероссийская школа-конференция  
молодых ученых*

*Россия, Иваново, 1-4 июля 2021 г.*



---

---

Иваново, 2021

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ РАН  
ИНСТИТУТ НЕФТЕХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА РАН  
ИНСТИТУТ ХИМИИ РАСТВОРОВ РАН  
ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
НИИ НАНОМАТЕРИАЛОВ (ИвГУ)  
УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

**«ОРГАНИЧЕСКИЕ И ГИБРИДНЫЕ  
НАНОМАТЕРИАЛЫ»**

**VIII Всероссийская школа-конференция  
молодых ученых**

**Россия, Иваново, 1–4 июля 2021 г.**

Иваново  
Издательство «Ивановский государственный университет»  
2021

ББК 24.5  
О 644

**Органические и гибридные наноматериалы : VIII**  
Всероссийская школа-конференция молодых ученых. Россия, Иваново, 1-4 июля 2021 г. – Иваново : Иван. гос. ун-т, 2021. – 260 с.

ISBN 978-5-7807-1361-6

В сборник включены статьи участников VIII Всероссийской школы-конференции молодых ученых «Органические и гибридные наноматериалы», которая состоялась на базе Ивановского государственного университета в г. Иваново 1-4 июля 2021 г. Материалы конференции посвящены разным аспектам исследования и использования наноматериалов.

Издание адресовано студентам, аспирантам, исследователям наноразмерного состояния вещества, а также преподавателям соответствующих разделов физики и химии.

*Печатается по решению редакционно-издательского совета  
Ивановского государственного университета*

*Ответственные за выпуск:*

д-р хим. наук, проф. **М. В. Ключев**  
канд. хим. наук **Н. А. Магдалинова**

ISBN 978-5-7807-1361-6

© ФГБОУ ВО «Ивановский  
государственный университет, 2021

V. 5, P. 18326.

3. Abdulagatov A.I., Hall R.A., Sutherland J.L., Lee B.H., Cavanagh A.S., George S.M. Molecular layer deposition of titanocene films using  $TiCl_4$  and ethylene glycol or glycerol: growth and properties // Chem. Mater. 2012. V. 24(15). P. 2854–2863.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНОЙ САМООРГАНИЗАЦИИ БЕЛКА АЛЬФА-КАЗЕИНА МЕТОДОМ ЯМР С ИМПУЛЬСНЫМ ГРАДИЕНТОМ МАГНИТНОГО ПОЛЯ**

Мельникова Д.Л., Несмелова И.В., Парфенова Д.А.,  
Четверикова А.Г., Скирда В.Д.

Институт физики КФУ, г. Казань, Республика Татарстан, Россия

В последнее десятилетие стало известно, что белки могут быть функционально активны не только в глобулярном, но и в частично или полностью развернутом состоянии [1]. Глобулярную структуру в нативном состоянии имеют в основном ферменты – белки, функция которых строго детерминирована. Белкам, взаимодействующим с большим числом партнеров, для функционирования требуется гораздо большая лабильность, и макромолекулы таких белков в нативном состоянии частично или полностью не структурированы. Функциональная роль внутренне неупорядоченных белков (ВНБ) может быть связана с необходимостью пластичности молекулы белка для эффективного узнавания молекул-партнеров [2-4]. Степень компактности полипептидной цепи зависит от состава аминокислотных остатков данного белка и от условий окружающей среды, включая концентрацию самого белка и / или скопления. Особый интерес составляет понять, как ведут себя ВНБ в широком диапазоне концентраций, от разбавленных до высококонцентрированных растворов. В частности, важным становится понимание трансляционной диффузии таких белков, которая является основным видом транспорта макромолекул в биологических или химических системах. Не смотря на то, что изучению трансляционной

диффузии белков посвящено достаточно много теоретических и экспериментальных исследований, большая часть из этих работ была посвящена глобулярным белкам [5-10]. Однако трансляционная диффузия внутренне неупорядоченных белков изучается гораздо реже.

Цель нашей работы состояла в изучении структурно-динамических особенностей трансляционной подвижности внутренне неупорядоченного белка альфа-казеина в водных растворах в широком диапазоне концентраций методом ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля (ИГМП).

Коэффициенты самодиффузии,  $D_s$ , были измерены с помощью метода ЯМР с ИГМП на ЯМР спектрометре Bruker AVANCE III 400 МГц, снабженном блоком импульсного градиента магнитного поля с максимальной величиной градиента 28 Тл/м. Эксперименты проводились с использованием последовательности стимулированного эха [11], при температуре 298 К. Исследуемые образцы готовили путем растворения соответствующих проб в дейтерированной воде.

В результате детального исследования трансляционной диффузии внутренне неупорядоченного белка альфа-казеина мы обнаружили несколько интересных особенностей. Установлено, что в концентрированных растворах трансляционная подвижность молекул альфа-казеина характеризуется широким спектром коэффициентов самодиффузии. Причем, для части молекул обнаружены признаки аномальной диффузии, свидетельствующие о формировании в концентрированных растворах альфа-казеина надмолекулярной структуры типа трехмерной сетки геля. Обнаружено, что эффекты самоорганизации в исследуемой системе существенным образом влияют на концентрационную зависимость средних коэффициентов самодиффузии.

Работа выполнена на кафедре физики молекулярных систем на оборудовании ЦКП ФХИ КФУ – импульсном спектрометре ЯМР AVANCE III 400 WB фирмы Bruker, оптимизированном для исследования твердых тел, самодиффузии, а также получения томограмм для объектов с диаметром не более 30 мм.

1. Uversky V.N., Gillspie J.R., Fink A.L. Why are “natively unfolded” proteins unstructured under physiologic conditions? // Proteins. 2000. V. 41. P. 415–427.

2. Dunker A.K., Lawson D.J. et al. Intrinsically disordered protein // *J. Mol. Graphics and Modelling*. 2001. V. 19. P. 26–59.
3. Uversky V.N. A protein-chameleon: conformational plasticity of alpha-synuclein, a disordered protein involved in neurodegenerative disorders // *J. Biomol. Struct. Dyn.* 2003. V. 21. P. 211–234.
4. Oldfield C.J., Cheng Y., Cortese M.S., Brown C.J., Uverskiy V.N., Dunker A.K. Comparing and combining of mostly disordered proteins // *Biochemistry*. 2005. V. 44. P. 1989–2000.
5. Berman H.M., Westbrook J., Feng Z., Gilliland G., Bhat T.N.; Weissig H.; Shindyalov I.N., Bourne P.E. The Protein Data Bank // *Nucleic Acids Res.* 2000. V. 28, № 1. P. 235–242.
6. Dyson H.J., Wright P.E. Intrinsically Unstructured Proteins and Their Functions // *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* 2005. V. 6, № 3. P. 197–208.
7. Habchi J., Tompa P., Longhi S., Uversky V.N. Introducing Protein Intrinsic Disorder // *Chem. Rev.* 2014. V. 114, № 13. P. 6561–6688.
8. Mao A.H., Crick S.L., Vitalis A., Chicoine C.L., Pappu R.V. Net Charge Per Residue Modulates Conformational Ensembles of Intrinsically Disordered Proteins // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 2010. V. 107, № 18. P. 8183–8188.
9. Uversky V.N. Unusual Biophysics of Intrinsically Disordered Proteins // *Biochim. Biophys. Acta.* 2013. V. 1834, № 5. P. 932–951.
10. Wang Y., Benton L.A., Singh V., Pielak G.J. Disordered Protein Diffusion under Crowded Conditions // *J. Phys. Chem. Lett.* 2012. V. 3, № 18. P. 2703–2706.
11. Tanner J.E. Use of Stimulated Echo in NMR-Diffusion Studies // *J. Chem. Phys.* 1970. V. 52, № 5. P. 2523–2537.

**«ОРГАНИЧЕСКИЕ И ГИБРИДНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ»**

**VIII Всероссийская школа-конференция**

**молодых ученых**

**Россия, Иваново, 1–4 июля 2021 г.**

Директор издательства Л.В. Михеева

*Издается в авторской редакции*

Подписано в печать 06.06.2021 г.

Формат 60 × 84 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>. Бумага писчая. Печать плоская. Заказ № 6.

Усл. печ. л. 15,0. Уч.-изд. л. 9,2. Тираж 500 экз.

Издательство «Ивановский государственный университет»

153025 Иваново, ул. Ермака, 39

(4932)93-43-41 E-mail: [publisher@ivanovo.ac.ru](mailto:publisher@ivanovo.ac.ru)

E-mail: [publisher@ivanovo.ac.ru](mailto:publisher@ivanovo.ac.ru)

ООО «Принткарт». 153045 Иваново, м. Афанасово,

ул. Новосельская, 5