

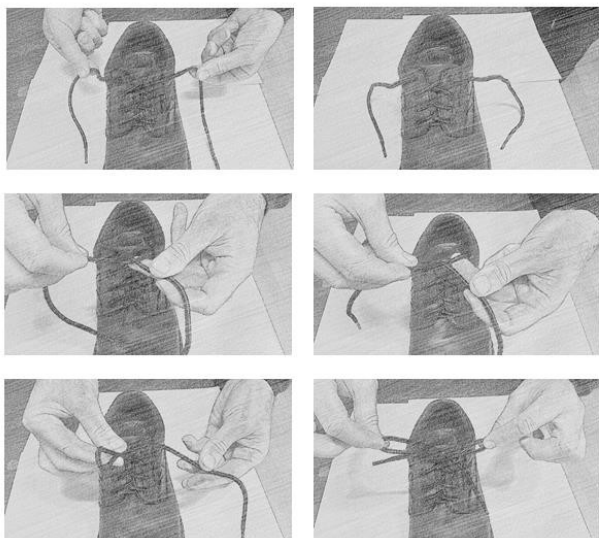
Molekulski vozli: izum priprave hitrega spontanega zvitja molekulskih nanostruktur

Vsem je poznano, da vozle zavežemo z določenim vrstnim redom križanja koncev vrvice. Kako pa zavežemo v vozle molekule, ki merijo nanometre? O strategiji načrtovanja molekul, ki se v določenem vrstnem redu v sestavijo v visoko zavozlane nanometrskе strukture poročajo raziskovalci Kemijskega inštituta. Zasnovali so piramido iz DNK, katere stranice merijo 5 nanometrov in dokazali, da se zelo hitro spontano zvije v želeno nanostrukturo. Avtorji raziskave, v kateri so sodelovali sintezni in strukturni biologi, matematiki in molekulski modelerji, menijo, da bodo molekulski vozli omogočili pripravo nanomaterialov z zanimivimi lastnostmi.

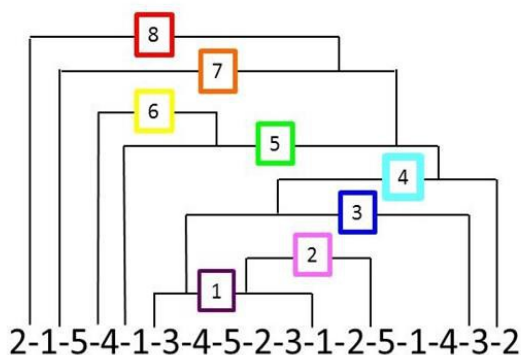
Človeštvo pozna in uporablja vozle že od pradavnine. Vozle se naučimo zavezati kot otroci in jih uporabljamo za privezovanje ladij, za izdelavo tkanin, ter drugih uporabnih in umetniških izdelkov. Iz vsakdanjega življenja vemo, da je za zavezovanje vozla pomemben vrstni red križanja koncev vrvice, npr. pri zavezovanju vezalk ali pletenju nogavic. Raziskovalci Laboratorija za biotehnologijo na **Kemijskem inštitutu** pod vodstvom prof. **Romana Jerale** poročajo o iznajdbi načina za pripravo molekulskih struktur, kjer se veriga molekule križa več kot 30-krat. Kot vemo iz vsakdanjih izkušenj z vozli, je pomemben pravilni vrstni red prekrivanja vrvice, če želimo zavezati željen vozle. Za razliko od ročnega zavezovanja vozlov v vsakdanjem življenju pa na nanometrski skali želimo, da se molekule zavežejo v vozle same od sebe. To lahko dosežemo tako, da v zaporedje polimerne molekule vgradimo informacijo o želeni končni strukturi in vrstnem redu križanja koncev verige, kar je novost tega dela. Za material so izbrali deoksiribonukleinsko kislino (DNK), ki je v naravi običajno nosilec dednega zapisa. V zadnjih treh desetletjih so namreč znanstveniki pokazali, da lahko uporabimo DNK tudi kot pameten gradbeni material za tvorbo popolnoma novih struktur in oblik, na primer tudi za izdelavo nanometrskęga zemljevida Slovenije. Za sestavljanje DNK nanostruktur običajno potrebujemo več kemijsko sintetiziranih verig in dolgotrajno počasno ohlajanje, kar ni najbolj tehnološko uporabno. Raziskovalci Kemijskega inštituta so določili pravila, ki omogočajo, da se DNK sama od sebe zavozla v želeno obliko piramide ali drugih struktur. Odkrili so, da je ključno, da na vsaki stopnji ostane prost vsaj en konec verige DNK, tako da se ta lahko kot nit uvije skozi obstoječe zanke v nastajajoči strukturi. **Vid Kočar**, doktorski študent in prvi avtor publikacije objavljene v **Nature Communications**, je pripravil načrt za štiristrano piramido, sestavljeno iz ene same verige DNK. Zasnoval je šest dizajnov piramide, ki so bili sestavljeni iz enakih segmentov DNK, ki tvorijo stranico piramide. Segmenti so bili v različnem vrstnem redu povezani v eno verigo, pri čemer je le optimalni dizajn upošteval pravilo prostih koncev, vrstni red povezovanja pa je predstavljala stabilnost posameznih stranic piramide. Izkazalo se je, da se je samo DNK na osnovi optimalnega dizajna hitro zvila v pričakovano strukturo. Če so DNK z visoke temperature hitro prestavili na led ali celo v tekoči dušik, se je le optimalni dizajn zvil brez težav. V raziskavi je pomembno vlogo igralo modeliranje, kjer sta sodelovala raziskovalca z **Univerze v Oxfordu**, prof. **Jonathan Doye** in **John Shreck**, ter matematika **Univerze v Ljubljani** ter **Univerze na Primorskem**, prof. **Tomaž Pisanski** in študent **Nino Baši**

Avtorji raziskave menijo, da bo poglobljena uporaba te inovativne tehnologije pri načrtovanju vozlov na osnovi proteinov, kot nadaljevanje dela na proteinskih nanostrukturah, ki so jih raziskovalci Kemijskega inštituta razvili pred dobrima dvema letoma in rezultate objavili v reviji **Nature Chemical Biology**. Ker so vozli zelo uporabni v tehnologiji, pričakujejo, da bodo s pomočjo molekulskih vozlov uspeli pripraviti nanomaterialne, ki bodo bolj trdno povezani in bodo imeli druge zanimive lastnosti.

Vrstni red povezovanja vezalk v vozlel



Vrstni red povezovanja koncev verige DNK za spontano sestavljanje piramide



Kočar in sod.,
Nat. Commun. 2016



Slika: Primerjava tvorbe vozlov v vsakdanjem življenju ter načrtovanega zaporedja povezovanja DNK segmentov za spontano tvorbo zavozlane nanometrske štiristrane piramide.

Objava:

Vid Kočar, John S. Schreck, Slavko Čeru, Helena Gradišar, Nino Bašič, Tomaž Pisanski, Jonathan P. K. Doye, Roman Jerala (2016) Design principles for rapid folding of knotted DNA nanostructures **Nature Communications** 10.1038/NCOMMS10803

Povezane objave:

Gradišar H, Božič S, Doles T, Vengust D, Hafner-Bratkovič I, Mertelj A, Webb B, Šali A, Klavžar S, Jerala R. (2013). Design of a single-chain polypeptide tetrahedron assembled from coiled-coil segments. **Nature Chem. Biol.** 9, 362-366.

Jerala, M., Jerala, R., Hafner-Bratkovič I. (2011) A DNA Origami of Slovenia in Nano Dimensions **Acta Chim.Slov.** 58, 181-184.