

МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОСБОРКИ СФЕРИЧЕСКИХ КОЛЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ И КАПСИДА ВИРУСА ИММУНОДЕФИЦИТА ЧЕЛОВЕКА.

Д.С. Рошаль, О.В. Коневцова, С. Б. Рошаль
 rochal.d@yandex.ru

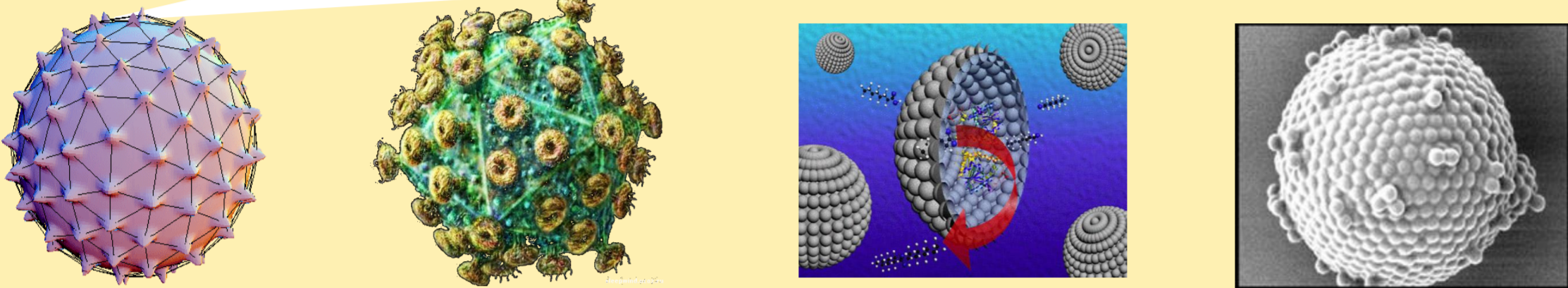
Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия



Цели работы:

Промоделировать сходства и различия в самосборке сферических коллоидных кристаллов и вирусов, в том числе вид дефектов и взаимодействие между ними как на сферической поверхности коллоидных кристаллов, так и на конусообразном капсиде вируса ВИЧ.

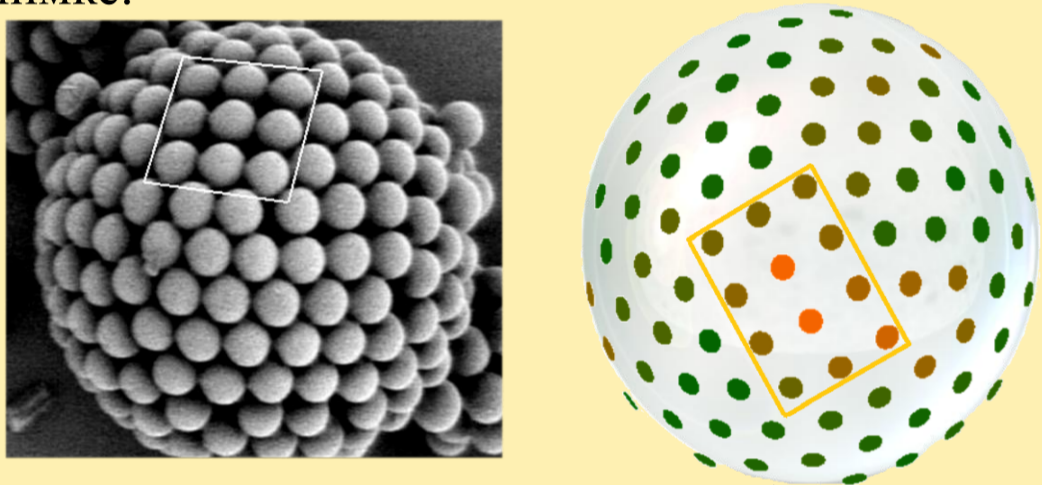
Системы со сферической упаковкой.



Топологические дефекты встречаются в мультieleктронных пузырьках в жидком гелии, вирусных оболочках, а также эмульсиях Пикеринга на сферических поверхностях, в том числе коллоидосомах [1] - системах достаточно плотно упакованных коллоидных частиц, расположенных на сферической границе раздела двух жидкостей. Поиск наиболее низкоэнергетических упаковок на поверхности таких объектов называется проблемой Томсона [3].

Топологические дефекты с зарядом +2

В 2002 коллоидосома была впервые получена. Почти всюду на её поверхности наблюдается гексагональный порядок. Однако, легко заметить область квадратного порядка размером 3×3 частицы на экспериментальном снимке.



Чтобы объяснить расположение частиц на поверхности коллоидосомы логично использовать потенциал Леннарда-Джонса. Моделирование показало, что если число частиц на поверхности коллоидосомы немного меньше максимального (96-98%), то может образовываться область квадратного порядка [1].

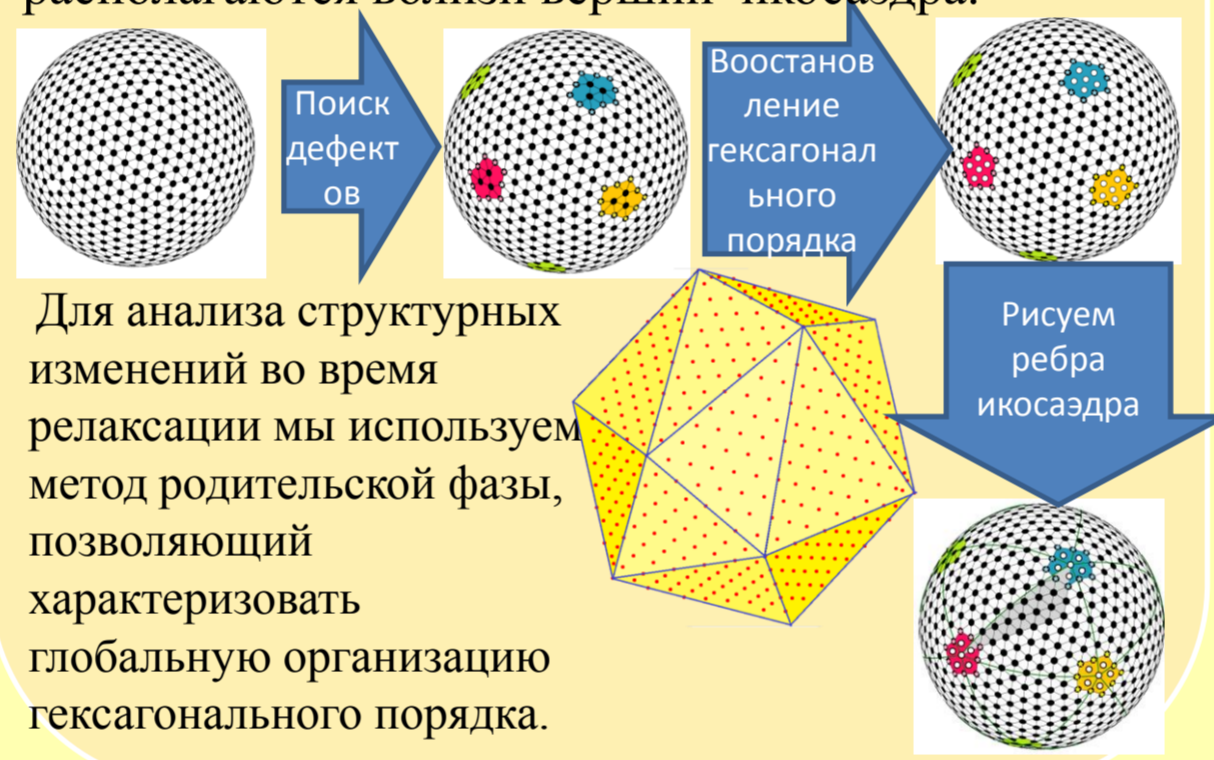
Согласно теореме Эйлера, сумма топологических зарядов на сфере равна 12. Область квадратного порядка может быть представлена как результат взаимодействия двух пентагональных дефектов. Её топологический заряд (+2) равен сумме топологических зарядов двух дисклинаций (+1) [1].

Очевидно, что в дефектных областях плотность упаковки частиц меньше. Поэтому проницаемость получаемого из коллоидосомы наноконтейнера увеличивается. Это важно для применений:

- Новые механизмы доставки лекарств.
- Медленное высвобождение косметических и пищевых добавок.

Топологические дефекты с зарядом +1

Наиболее распространенные дефекты в сферических кристаллах - это дислокации и дисклинации. Однако при большом количестве частиц на поверхности кристалла они объединяются [2] в протяженные топологические дефекты с зарядом +1. Эти 12 дефектов располагаются вблизи вершин икосаэдра.



Для анализа структурных изменений во время релаксации мы используем метод родительской фазы, позволяющий характеризовать глобальную организацию гексагонального порядка.

Передемпированная молекулярная динамика

$$U = \sum_{j>i} \frac{1}{r_{ij}}$$

Уравнение движения для i-ой частицы:

$$m \mathbf{a}_i \Big|_{\parallel} = \left(-\eta \mathbf{v}_i + \mathbf{F}_i(T, t) - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i} \right) \Big|_{\parallel}$$

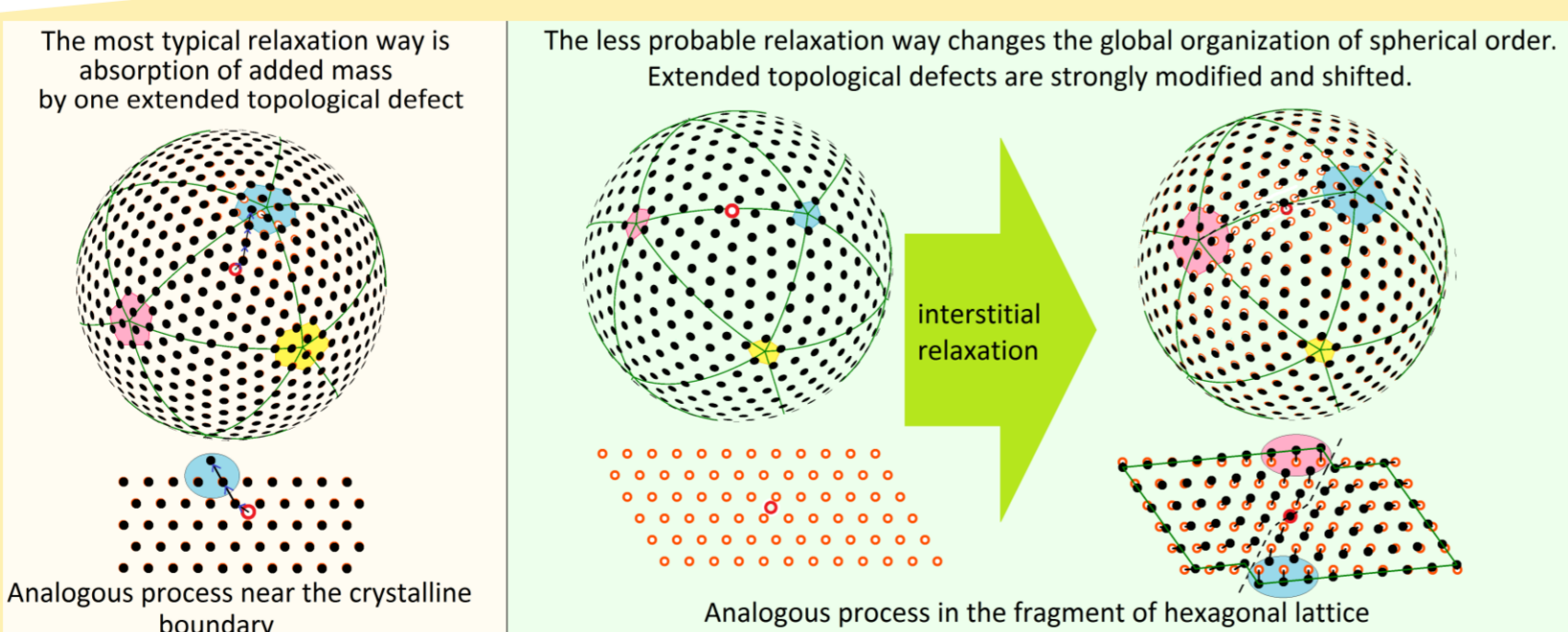
Так как $m \sim d^3$, $\eta \sim d$, где $d \sim 1 \mu\text{m}$ - размер частицы, то левая часть уравнения ≈ 0 .

$$d \mathbf{r}_i \Big|_{\parallel} = \frac{dt}{\eta} \left(\mathbf{F}_i(T, t) - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i} \right) \Big|_{\parallel}$$

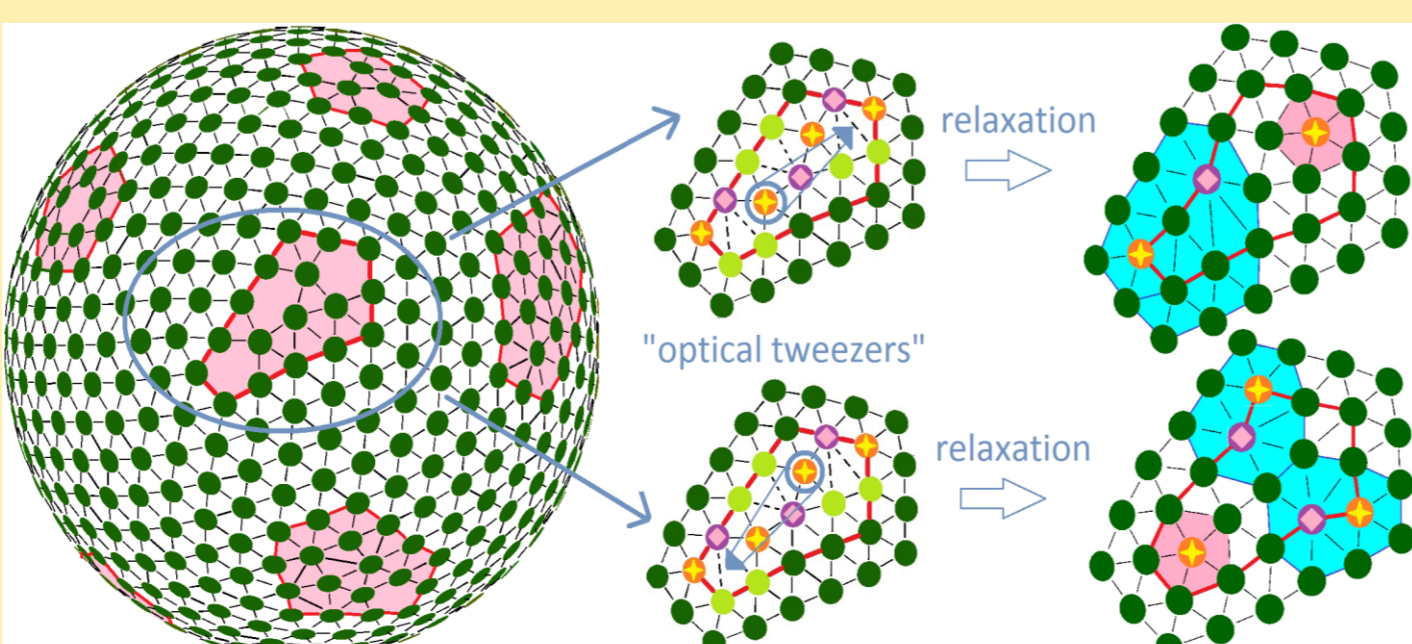
При $T = 0$ численное решение сводится к минимизации энергии методом градиентного спуска.

Релаксация позиций внедрения и взаимодействие дефектов в сферических коллоидных кристаллах

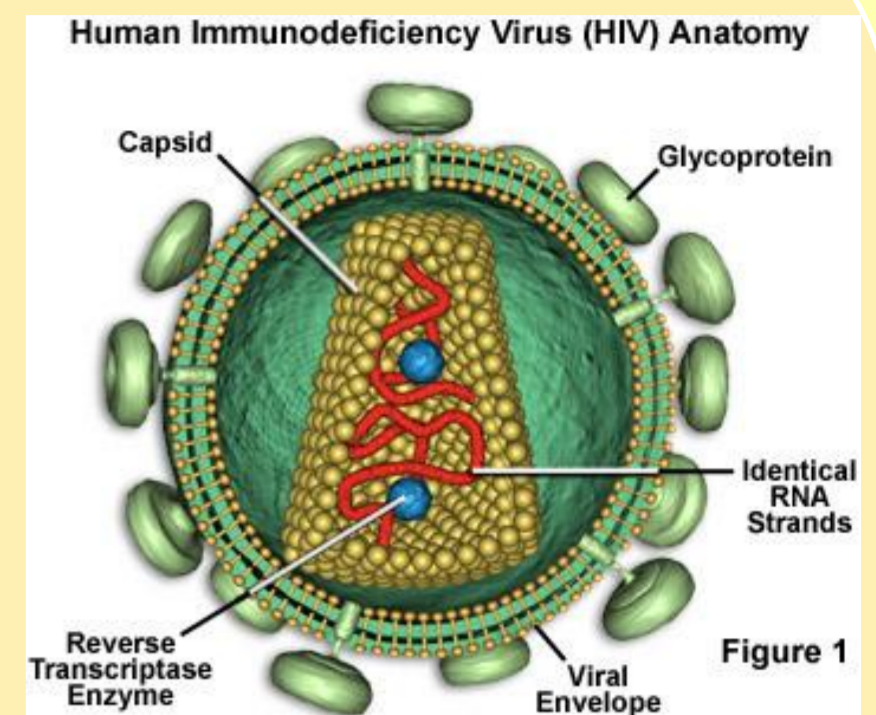
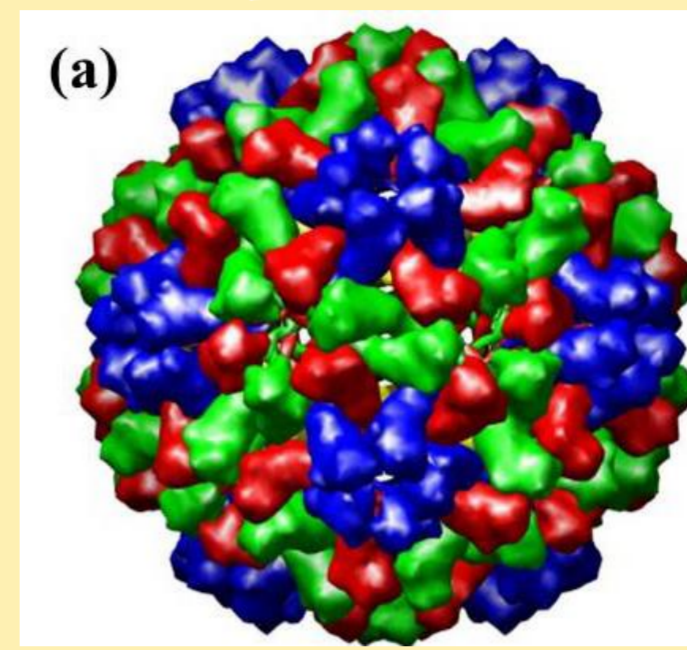
Коллоидные кристаллы активно изучаются по средством изменения их структуры. Однако статистический анализ результатов эксперимента ограничен временем жизни и уникальной структурой объекта. Здесь мы численно исследуем различные пути релаксации структуры, после добавления в неё позиции внедрения [4].



Также рассмотрены [3] вынужденные изменения структуры коллоидного кристалла при перемещении частиц виртуальным оптическим пинцетом с точки зрения реакций между дефектами. Показано несохранение дислокационного заряда (вектора Бюргерса) в таких реакциях.

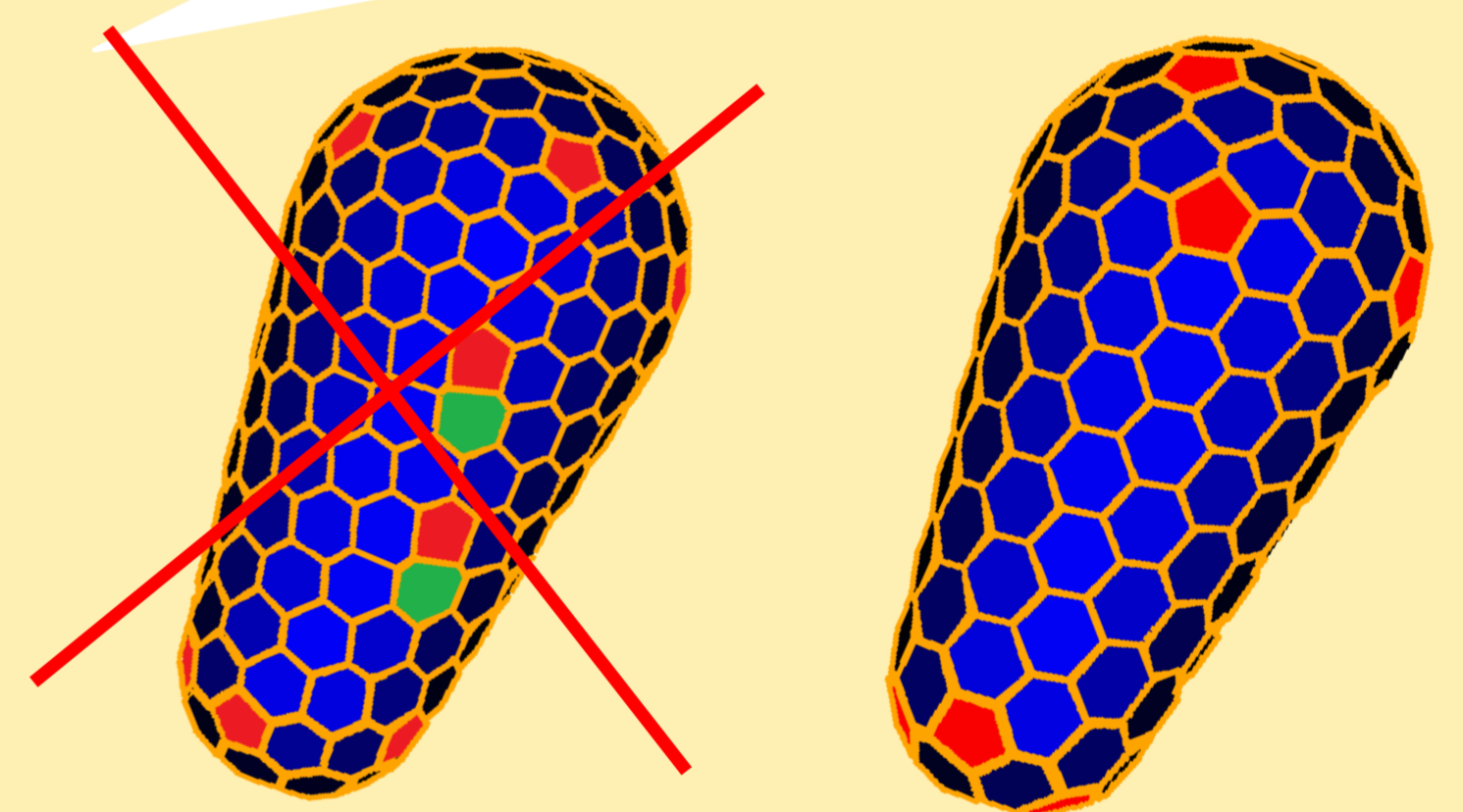


Строение вирусов



Большинство вирусов также имеют сферическую форму, но в отличие от коллоидных кристаллов характеризуется точной икосаэдрической симметрией и топологическими дефектами минимального размера - точечными дисклинациями (пентамерами). В процессе созревания ВИЧ внутри сферической липидной оболочки, укрепленной белками матрицы, удивительным образом собирается конусообразный капсид, характеризуемый несимметричным расположением 12 пентамеров. Некоторые из биологических теорий образования конического капсида предполагают, что он растет на белках нуклеокапсида с опорой на внешнюю сферическую оболочку и внутренний геном.

Моделирование ВИЧ-подобных двумерных оболочек.



Нами предложен способ получения двумерных структур, расположение частиц в которых подобно расположению капсомеров в капсиде ВИЧ. Способ основан на минимизации энергии отталкивающихся частиц, удерживаемых на конусообразной поверхности со сферическими шапочками. В отличие от коллоидных кристаллов, на поверхности капсида вируса отсутствуют нетривиальные топологические дефекты. Показано, что избавиться от таких дефектов можно, добавляя узлы в точки на поверхности с наименьшим потенциалом и минимизируя энергию системы. После нескольких подобных операций модельная структура оказывается содержащей лишь 12 тривиальных дисклинаций, взаимодействие между которыми сводится к их взаимному отталкиванию. При этом 7 дефектов располагаются на большей сферической шапочке, а 5 на меньшей.

Выводы

- Плотность упаковки частиц на поверхности коллоидосомы зависит от числа и расположения дефектов, которые определяют проницаемость наноконтейнеров, получаемых из коллоидосом, что важно для различных применений, в т.ч. для адресной доставки лекарств.
- Реакции между дефектами в сферическом гексагональном порядке могут изменить суммарный вектор Бюргерса участвующих дислокаций.
- Оценена вероятность различных путей релаксации позиции внедрения в сферических коллоидных кристаллах. Показано, что в наиболее вероятном процессе релаксации участвует лишь 1 топологический дефект.
- Модифицировав известную модель самосборки сферических коллоидных кристаллов, мы смогли получить двумерные структуры, подобные устройству капсида ВИЧ.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №15-12-10004).

1. D.S. Roshal, **Formation of Square Order Areas on the Colloidosome Surface** Phys. Solid State 55, 2128 (2013).
2. D. S. Roshal, K.Yu. Petrov, A.E. Myasnikova, S.B. Rochal, **Extended topological defects as sources and outlets of dislocations in spherical hexagonal crystals**, Phys. Lett. A 378, 1548 (2014).
3. D.S. Roshal, A.E. Myasnikova, S.B. Rochal, **Slightly broken icosahedral symmetry advances Thomson problem**, Phys. Lett. A. 379, 372 (2015).
4. D.S. Roshal, A.E. Myasnikova, S.B. Rochal, **Relaxation of interstitials in spherical colloidal crystals**, Physica E, 75, 295 (2016).