



Warszawa, 15 marca 2016

W kubosomach liczy się wnętrze

W pewnych warunkach odpowiednio dobrane cząsteczki mogą formować w cieczach zamknięte powierzchnie o zadziwiająco skomplikowanych kształtach, tnące przestrzeń regularną siecią kanałów. Kubosomy – taką nazwę noszą te spektakularne trójwymiarowe nanoobiekty – dotychczas oglądaliśmy wyłącznie z zewnątrz. Zaawansowane modelowanie teoretyczne przeprowadzone w Instytucie Chemii Fizycznej PAN w Warszawie po raz pierwszy pozwoliło zajrzeć do ich wnętrza.

Gdy widzi się je po raz pierwszy, trudno nie oprzeć się wrażeniu, że zostały zaprojektowane przez inżyniera-perfekcjonistę, a nie samą naturę. Mowa o kubosomach, nanoobektach o na ogół sześciennym kształcie, podziurawionych równie regularnie jak blok mieszkalny rzędami okien. Kubosomy mają rozmiary od kilkudziesięciu do kilkuset nanometrów. Dotychczas badano je głównie za pomocą mikroskopów elektronowych, co umożliwiło opisanie ich zewnętrznych kształtów. Jednak żadna z obecnie dostępnych technik eksperymentalnych nie pozwalała szczególnie spenetrować wnętrza tych niezwykłych struktur.

„Gdzie doświadczałnik nie może, tam teoretyka pośle. Skutecznym sposobem na zajrzenie do wnętrza kubosomów okazało się modelowanie teoretyczne z użyciem komputerów. Nasze obliczenia numeryczne pozwoliły stwierdzić, że struktura wewnętrzna kubosomów może być znacznie bardziej złożona niż pierwotnie sądziliśmy”, mówi dr hab. Wojciech Gózdź z Instytutu Chemii Fizycznej PAN (IChF PAN) w Warszawie, którego publikacja o kubosomach ukazała się niedawno w uznanym czasopiśmie naukowym „Langmuir”.

Pod względem budowy kubosomy są podobne do kryształów – bo tak jak w kryształach, tak w kubosomach można wyróżnić powtarzającą się, podstawową 'cegiełkę', nazywaną komórką elementarną. Lecz podobieństwo nie jest idealne: o ile w kryształach komórkę elementarną tworzy grupa charakterystycznie i zawsze tak samo rozmieszczonych atomów lub cząsteczek, o tyle w kubosomach jest nią wycinek odpowiednio ukształtowanej błony zanurzonej w wodzie.

„Kubosomy mogą być zbudowane z różnych komórek elementarnych, odpowiadających różnym strukturom kubicznym. Złożony z takich komórek pojedynczy kubosom nieco przypomina gąbkę. Gąbki mają jednak chaotyczną strukturę wewnętrzną, podczas gdy w kubosomach jest ona bardzo, bardzo regularna”, opisuje dr Gózdź i uzupełnia: „Kubosom można sobie wyobrazić jako zamkniętą powierzchnię. Prostym przykładem zamkniętej powierzchni jest torus. Jednak w torusie jest tylko jedna dziura, podczas gdy w kubosomach takich dziur mamy zwykle od kilkudziesięciu do nawet kilku tysięcy”.

W odpowiednich warunkach i przy zastosowaniu odpowiednich procedur eksperymentalnych kubosomy formują się w środowisku ciekłym zawierającym cząsteczki amfifilowe, czyli takie, których jeden koniec jest hydrofobowy (unika wody), a drugi hydrofilowy ('lubi' wodę). W wodzie cząsteczki amfifilowe mogą utworzyć warstwę podwójną (dwuwarstwę) zbudowaną w taki sposób, że zakończenia hydrofilowe znajdują się na zewnątrz warstwy, a hydrofobowe są skierowane do jej środka. Kubosomy mogą powstawać także w cieczach trójskładnikowych, składających się z wody, oleju i cząsteczek amfifilowych. Cząsteczki tworzą wtedy nie dwuwarstwę, a monowarstwę zwrócone zakończeniami hydrofilowymi ku wodzie, a hydrofobowymi ku olejowi.

Przestrzennie uformowana błona, tworząca każdy kubosom, jest zamknięta i podziurawiona regularną siatką tuneli. Tunele wypełnia ciecz, w której kubosom jest zanurzony. Jeśli roztwór, w którym narodził się kubosom, był dwuskładnikowy, tą samą cieczą będzie wypełniona przestrzeń kubosomu zamknięta błoną (w roztworze trójskładnikowym byłaby to inna ciecz niż w tunelach). Dlatego każdy kubosom można także traktować jako regularną, przestrzenną siatkę kanałów wypełnionych cieczą (lub dwiema cieczami). Tak postrzegany, kubosom staje się strukturą krystaliczną uformowaną z ciekłych 'prętów' otoczonych cząsteczkami amfifilowymi.

W swoich badaniach dr Góźdz skoncentrował się na kubosomach zbudowanych z dwuwarstw, ponieważ przeważnie takie układy były badane eksperymentalnie i mogą one mieć w przyszłości wiele zastosowań jako nośniki leków. Kształty nanocząstek tego typu próbowano wcześniej opisywać za pomocą sztucznie dopasowywanych funkcji matematycznych. W IChF PAN do zbadania struktury kubosomów po raz pierwszy użyto modelu zbudowanego na równaniach fizycznych. Wyniki obliczeń numerycznych doprowadziły do kilku interesujących odkryć.

„Zauważyliśmy na przykład, że rozmiar komórki elementarnej w kubosomach może się różnić od rozmiaru pojedynczej komórki elementarnej w roztworze. Kubosomy mogą bowiem puchnąć lub kurczyć się, tak aby powstała struktura miała jak najmniejszą energię. Jeśli rozmiar komórki elementarnej wewnątrz kubosomu pozostaje taki sam jak w roztworze, wtedy komórki przy ściankach kubosomu mogą ulec znacznej deformacji”, mówi dr Góźdz.

Badania w IChF PAN doprowadziły do jeszcze bardziej zaskakującego wniosku: dwa zewnętrznie praktycznie identyczne kubosomy mogą się znacznie różnić budową wewnętrzną. Ta obserwacja ma istotną wartość praktyczną z uwagi na jedno z najważniejszych potencjalnych zastosowań kubosomów: rozprowadzanie leków w organizmie. Obecnie stosuje się w tym celu liposomy, sferyczne pęcherzyki, których błonę tworzy podwójna warstwa lipidowa. W porównaniu z liposomami, kubosomy mają znacznie bogatszą, mniej jednorodną strukturę wewnętrzną. Lek wprowadzony w przestrzenną sieć kanałów kubosomu uwalniałby się dłużej i w dokładniej kontrolowanych dawkach. Zatem odkryta w IChF PAN możliwość zmian struktury wewnętrznej kubosomów bez znaczącego wpływu na ich zewnętrzne rozmiary i kształty otwiera drogę do precyzyjnego operowania szybkością uwalniania leków.

Modelowanie struktur kubosomów sfinansowano z grantu OPUS Narodowego Centrum Nauki.

Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (<http://www.ichf.edu.pl/>) został powołany w 1955 roku jako jeden z pierwszych instytutów chemicznych PAN. Profil naukowy Instytutu jest silnie powiązany z najnowszymi światowymi kierunkami rozwoju chemii fizycznej i fizyki chemicznej. Badania naukowe są prowadzone w dziewięciu zakładach naukowych. Działający w ramach Instytutu Zakład Doświadczalny CHEMIPAN wdraża, produkuje i komercjalizuje specjalistyczne związki chemiczne do zastosowań m.in. w rolnictwie i farmacji. Instytut publikuje około 200 oryginalnych prac badawczych rocznie.

KONTAKT:

dr hab. **Wojciech Góźdz**
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
tel. +48 22 3433242
email: wgozdz@ichf.edu.pl

PUBLIKACJE NAUKOWE:

„Cubosome Topologies at Various Particle Sizes and Crystallographic Symmetries”; W. T. Gózdź; Langmuir 11/2015, 31(49); DOI: 10.1021/acs.langmuir.5b03799

POWIĄZANE STRONY WWW:

<http://www.ichf.edu.pl/>

Strona Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk.

<http://www.ichf.edu.pl/press/>

Serwis prasowy Instytutu Chemii Fizycznej PAN.

MATERIAŁY GRAFICZNE:

ICHF160315b_fot01s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2016/03/ICHF160315b_fot01.jpg

Dwa kubosomy o niemal identycznym wyglądzie mogą się znacząco różnić budową wewnętrzną, odkryli naukowcy z Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. (Źródło: IChF PAN)

ICHF160315b_fot02s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2016/03/ICHF160315b_fot02.jpg

Rzeczywiste kubosomy na zdjęciu z mikroskopu elektronowego. Kolory sztuczne. (Źródło: L. Latypova, P. Pierański; Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, Orsay Cedex, France)