

## Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-0451-11****Nanoštruktúra v makromolekulových systémoch indukovaná stesnaním**Zodpovedný riešiteľ **RNDr. Peter Cifra, DrSc.**Príjemca **Ústav polymérov SAV**

### Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Ústav polymérov SAV
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

### Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

- 1.
- 2.
- 3.

### Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

### Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. Z. Benková, P. Námer, P. Cifra, From stripe to slab confinement for linearization of macromolecules in nanochannels, *Soft Matter* 11, 2279-2289 (2015), IF = 4.151
2. RAČKO, Dušan - CIFRA, Peter. Segregation of semiflexible macromolecules in nanochannel. In *Journal of Chemical Physics*, 2013, vol. 138, art.no. 184904. (3.164 - IF2012).
3. Z. Benková, M. N. D. S. Cordeiro, Molecular dynamics simulations of poly(ethylene oxide) grafted onto silica immersed in melt of homopolymers. *Langmuir* 31, 10254-10264 (2015), IF = 4.457
4. PALENČÁR, Peter - BLEHA, Tomáš. Buckling transition in long alpha-helices. In *Journal of Chemical Physics*, 2014, vol. 141, 174901 - 12 p. (3.122 - IF2013).

## **Uplatnenie výsledkov projektu**

Boli získané nové originálne poznatky o stiesnených makromolekulách v nanokanáloch v súvislosti s analýzou genomických makromolekúl v nanofluidných zariadeniach, ale aj so situáciami v zahustenom biologickom prostredí. Pokles celkového rozmeru makromolekúl pozdĺž kanálu ich lokálnym skladaním/spätným ohybom/, spolu so zvýšeným vystretím sekvencií bežiacich v kanáli vedľa seba, je známy a komplikuje linearizačné experimenty v oblasti analýzy DNA pri používaných hrúbkach kanálov. Menej známy je príbuzný efekt za prítomnosti viacerých reťazcov v kanáli pri ich prekryve, dôležitý aj v iných súvislostiach. Záujem o vyhodnotenie segregácie obmedzovaných makromolekúl pochádza aj z oblasti štúdií segregácie v bakteriálnych chromozómoch. Celkovo, výsledky o spätnom ohýbaní reťazcov nanokanáloch, o segregácii reťazcov v týchto kanáloch, detaily správania lineárnych a makrocyclických reťazcov pri linearizácii, či využitie kanálov s asymetrickým profilom reprezentujú zistenia ktoré budú mať implikácie pre jednomolekulové charakterizácie lineárnej a makrocyclickej DNA v nanofluidných zariadeniach. Naše publikované práce sú už citované v experimentálnych aj teoretických výskumných skupinách a tak prispievajú ku interpretácii v tejto problematike. Napríklad naša predpoveď pri porovnaní linearizácie lineárnych polymérov a makrocyclov bola nedávno experimentálne potvrdená (F. Westerlund, Macromolecules, 48, 871, 2015).

## **CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV**

### **Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku** (max. 20 riadkov)

Ciele prispieť ku poznaniu v oblasti stesnených polymérov, špeciálne v oblasti linearizácie DNA v nanofluidných zariadeniach, ale aj so širším dopadom ku poznatkom o obmedzovaných polyméroch boli splnené. Je to možné dobre dokladovať 10-timi publikáciami v kvalitných časopisoch s vysokým impakt-faktorom (IF) z oblasti makromolekulárnej vedy a biofyziky. Podobne tieto výsledky sú preberané viacerými výskumnými laboratóriami vo svete ako je zrejmé z citácií predložených prác. Štrukturálne prechody v tvare makromolekúl pri ich stesnaní v kanáloch, póroch a schránkach sprevádzajú javy súvisiace s genomickými a inými makromolekulami v ich prirodzenom prostredí, ich charakterizácii, alebo nových experimentoch typu laboratória na mikročipe. Pomocou počítačových simulácií a teoretických prístupov sa stanovujú podmienky tvorby nanoštruktúr ako sú sponkovité štruktúry v kanáloch, stočené cievkovité štruktúry v schránkach vírusov, správanie cyklických makromolekúl alebo segregácia makromolekúl pri ich obmedzovaní s dopadmi napríklad pre delenie v bakteriálnych chromozómoch. Nájdenie spoločných črt správania takýchto systémov pomocou prístupu makromolekulovej vedy a prenos poznatkov do oblasti biologických systémov napomáha pri súčasnom trende ku kvantifikácii v biológii. Porozumenie mechanizmu vystierania makromolekúl ako DNA v nanokanáloch je nevyhnutné pre interpretáciu experimentov v nanofluidných zariadeniach typu lab-on-chip používaných pri analýze genomických makromolekúl.

### **Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku** (max. 20 riadkov)

Structural transitions in shape of macromolecules confined in nanochannels, pores and cavities underlie phenomena related to genomic and other biomacromolecules in their natural environment, at their characterization or recent novel lab-on-chip experiments. Using computer simulations and theoretical approaches we establish conditions for nanostructure formation such as hairpins, chain backfolding, toroidal structures in virus capsids, behavior of confined cyclic macromolecules or segregation of macromolecules confined in channels with impact to segregation in bacterial chromosomes. Finding common features in this behavior of these systems using approaches of macromolecular science and transfer of knowledge to

biological systems fosters current trend of quantification in biology. Understanding mechanism of linearization of chain such as DNA in nanochannels is inevitable in interpretation of experiments in nanofluidic devices used for analysis of genomic macromolecules.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

**Zodpovedný riešiteľ**

RNDr. Peter Cífra, DrSc.

V Bratislave 25.01.2016

**Štatutárny zástupca príjemcu**

Ing. Igor Lacík, DrSc.

V Bratislave 25.01.2016

.....  
podpis zodpovedného riešiteľa

.....  
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu