

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-15-0323**

Štrukturálne prechody (bio)makromolekúl v nanokanáloch

Zodpovedný riešiteľ **RNDr. Peter Cifra, DrSc.**

Príjemca **Ústav polymérov SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Ústav polymérov SAV

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

nemali sme spoluriešiteľov

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

projekt bol teoreticky zameraný

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

Z. Benková, P. Námer and P. Cifra, Comparison of stripe and slab confinement for ring and linear macromolecules in nanochannel, *Soft Matter*, 12, 8425-8439, 2016, IF2014: 4.029

Z. Benková, L. Rišpanová and P. Cifra, Structural Behavior of a Semiflexible Polymer Chain in an Array of Nanoposts, *Polymers* 9(8), 313, 2017, IF = 3.364

BENKOVÁ, Zuzana - RIŠPANOVA, Lucia - CIFRA, Peter. Effect of chain stiffness for semiflexible macromolecules in array of cylindrical nanoposts. *Journal of Chemical Physics*, 2017, vol.147, art.no. 134907. (2.965 - IF2016).

Tomáš Bleha, Peter Cifra, Stretching and compression of DNA by external forces under nanochannel confinement, *Soft Matter*, 14, 1247-1259, 2018, (IF2016=3.89)

Tomáš Bleha, Peter Cifra, Correlation anisotropy and stiffness of DNA molecules confined in nanochannels, *Journal of Chemical Physics*, 149(5):054903, 2018 (2.843 - IF2017).

Lucia Rišpanová, Zuzana Benková and Peter Cifra, Block Copolymer of Flexible and Semi-Flexible Block Confined in Nanopost Array, *Polymers* 2018, 10(12), 1301; <https://doi.org/10.3390/polym10121301>, Special Issue „Polymer on confinement“, IF=2.935 (2017) ; 5-Year Impact Factor: 3.509 (2017)

BENKOVÁ, Zuzana - D. S. CORDEIRO, M. Natália. Coating of Nanoparticles in Aqueous Solutions: Insights from Molecular Dynamics Simulations. In *Aqueous Phase Adsorption Theory, Simulations and Experiments*. – Boca Raton, USA : Taylor & Francis Group, LLC, 2019, chapter 5, ISBN-13: 978-1-138-57521-9 (Hardback) ISBN-13: 978-1-351-27252-0 (eBook)

BLEHA, Tomáš - CIFRA, Peter. Force-displacement relations at compression of dsDNA macromolecules. In *Journal of Chemical Physics*, 2019, vol. 151, art.no. 014901, [10]p.

(2.997 - IF2018). ISSN 0021-9606.

RAČKO, Dušan - BENEDETTI, Fabrizio - DORIER, Julian - STASIAK, Andrzej. Are TADs supercoiled? In *Nucleic acids research*, 2019, vol. 47, no. 2, p. 521-532. (11.147 - IF2018). ISSN 0305-1048

Tomáš Bleha, Peter Cifra, Compression and Stretching of Single DNA Molecules under Channel Confinement, *J. Phys. Chem. B* 2020, (IF=2.923), 124, 9, 1691-1702

Zuzana Benková, Lucia Rišpanová and Peter Cifra, Conformation of Flexible and Semiflexible Chains Confined in Nanoposts Array of Various Geometries, *Polymers* 2020, 12(5), 1064; IF=3.542, <https://doi.org/10.3390/polym12051064>

Uplatnenie výsledkov projektu

Sledovanie priestorového obmedzovania biomakromolekúl ako DNA v nanokanáloch prostredníctvom počítačových experimentov a interpretácie pomocou fyziky polymérov na jednej strane prispelo ku prehĺbeniu znalostí o procesoch zahŕňajúcich takéto vplyvy a na druhej strane má dopad napríklad pri dizajne nových mikrofluidných zariadení pre sledovanie a charakterizáciu takýchto makromolekúl jednotlivito. Detailnejšie simulácie aj so zahrnutím superstáčania týchto reťazcov viedlo priamo aj ku kvalitným štúdiám biologického správania týchto makromolekúl a to pri popise tvorby slučiek jednotlivých makromolekúl, ktoré je významné v biologických procesoch, pri štúdiu existencie a podmienok tvorby uzlov, ale aj pri popise celkovej organizácie častí genómu. Súčasné citácie našich prác odrážajú aktuálnosť týchto štúdií v danej oblasti.

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

Rovnovážne podmienky správania polotuhých makromolekúl ako je DNA pri ich obmedzovaní v nanokanáloch boli stanovené za rôznych podmienok ich stesnania, čo sa týka miery obmedzovania či tvaru kanálov. Zamerali sme sa na cylindrický a úzky štrbinový kanál, kde v dôsledku kvázi-dvojmerného priestoru dochádza ku žiadanému silnejšiemu vystieraniu reťazcov. Podobne sa sledovali vplyvy zmeny topológie reťazcov, kde sa sledovali lineárne reťazce, makromolekulárne ringy a lineárne blokované kopolyméry, alebo aj topológia obmedzovania, kde sa sledovalo obmedzovanie makromolekúl v poli nanopostov. V systéme nanopostov dochádza ku zaujímavému súčasnému obmedzovaniu makromolekúl medzi nanopostami a ku ich rozdeľovaniu medzi intersticiálnymi priestormi medzi nanopostami. Takéto systémy sú vhodnejšie na charakterizáciu makromolekúl ako neusporiadané gély a stávajú sa súčasťou moderných mikrofluidných analyzátorov.

Zahrnutie vplyvu ďalších vonkajších síl pri sledovaní priestorového obmedzovania makromolekúl, reprezentuje súčasný trend jednomolekulových experimentov hlavne s DNA za účasti rôznych vonkajších vplyvov ako je hydrodynamické pole, optické či magnetické pinzety ovládajúce priamo reťazce alebo ich uzatváranie v kanáli mikrosférami, či účasť AFM hrotov pri jednomolekulových experimentoch.

Pri prenose výsledkov do biofyziky DNA nám výrazne pomohlo zahrnutie superstáčania týchto reťazcov, čo viedlo ku kvalitným štúdiám biologického správania týchto makromolekúl a to pri popise procesov tvorby slučiek jednotlivých makromolekúl, pri štúdiu existencie a podmienok tvorby uzlov, ale aj pri popise celkovej organizácie častí genómu.

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

Equilibrium behaviour of semiflexible macromolecules such as DNA under spatial confinement in nanochannels was estimated under various conditions of confinement strength and channel shape. We focused on cylindrical or a narrow slit like channel in which desirable more extensive extension of macromolecules appear as a result of quasi two dimensional space.

Analogously the effect of chain topology was investigated focusing on linear macromolecules, macromolecular rings or linear block copolymers. The effect of confinement topology on macromolecules was investigated in array of nanoposts. In system of nanoposts an interesting interplay of simultaneous confinement of macromolecules in between nanoposts and their partitioning among interstitial spaces between nanoposts exits. These systems are suitable for characterization of macromolecules, may replace the disordered gels in this role and already become the part of modern microfluidic analyzers.

Including the effect of external forces in our studies of macromolecular confinement represents an actual trend in single molecule experiments, especially with DNA, where hydrodynamic field, optical or magnetic tweezers that control macromolecules directly or control their closure in channel by microspheres, or participation of AFM tips in single molecule experiments are used.

In transfer of results to biophysics of DNA inclusion of supercoiling of these macromolecules was extremely helpful. This lead to high quality studies of biological behavior of these macromolecules such as characterization of loop formation processes of single macromolecule, existence of knots and their formation and description of overall organization of parts of genome.