

**Рентгеноспектральное исследование и компьютерное моделирование особенностей атомной и электронной структуры цинка в липидных слоях арахидоновой кислоты**

**Научный руководитель – Яловега Галина Эдуардовна**

*Кременная М.А.<sup>1</sup>, Лысенко В.Ю.<sup>2</sup>*

1 - Южный федеральный университет, Физический факультет, Кафедра физики твердого тела, Ростов-на-Дону, Россия, *E-mail: kremennaya@sfedu.ru*; 2 - Южный федеральный университет, Физический факультет, Кафедра физики твердого тела, Ростов-на-Дону, Россия, *E-mail: viktoriya.250699@mail.ru*

Липидные слои по своему составу и морфологии могут представлять собой модели биологических мембран [1]. Жизненно важные клеточные процессы зависят от контролируемого транспорта ионов металлов через липидные слои. Объектом данного исследования является атомная и электронная структура ионов цинка при взаимодействии с липидными слоями арахидоновой кислоты на поверхности жидкости.

Ранние исследования показали, что монослои арахидоновой кислоты чувствительны к неорганическим ионам в водной субфазе [3]. Присутствие неорганических ионов в субфазе изменяет упорядочение молекул монослоев арахидоновой кислоты на границе раздела воздух-вода [2]. Карбоксильная группа арахидоновой кислоты может координироваться с ионами металлов из водных субфаз с помощью различных типов связи. Карбоксилат-анион может координировать с атомами металла как монодентатный или полидентатный лиганд. Из-за высокой подвижности молекул арахидоновой кислоты при контакте монослоя с ионами металлов происходит структурная перестройка всего монослоя. Для случая раствора  $NiCl_2$  было показано, что арахидоновая кислота на поверхности субфазы способствует образованию наночастиц никеля или их кластеров под монослоем [4].

В рамках данного исследования проведен анализ экспериментальных спектров рентгеновского поглощения для К-краев цинка в липидных слоях арахидоновой кислоты на поверхности жидкости во флуоресцентной моде в условиях полного внешнего отражения полученных в работе [5]. Анализ проводился по методу «отпечатка пальца». Метод состоит в сопоставлении экспериментальных спектров исследуемых соединений с экспериментальными спектрами известных соединений, что позволяет с определенной точностью определить локальную структуру вокруг исследуемого элемента. Таким образом, результаты проведенного анализа показали, что изменения экспериментальных спектров являются результатом изменения локального окружения ионов цинка в процессе эксперимента по сравнению с его окружением в  $ZnCl_2$ . Данные изменения объясняются взаимодействием ионов цинка с полярными группами молекул арахидоновой кислоты, было установлено, что в процессе взаимодействия молекул арахидоновой кислоты с водным раствором  $ZnCl_2$  локальное окружение ионов цинка соответствует окружению в  $ZnO$ . На основе полученных данных проведено моделирование структуры локального окружения ионов цинка в липидных слоях арахидоновой кислоты при помощи квантово-химических расчетов на основе теории функционала электронной плотности (Density Functional Theory - DFT). Для полученных структурных моделей были рассчитаны теоретические спектры рентгеновского поглощения для К-краев цинка в программе FDMNES и проведено сравнение с экспериментальными спектрами. На основании хорошего согласия теоретических и экспериментальных спектров определены возможные способы связывания ионов цинка из водной субфазы с карбоксильными группами монослоя арахидоновой кислоты на границе раздела воздух-жидкость.

Авторы выражают благодарность Гранту Президента МК-2767.2021.1.2 за финансовую поддержку исследования.

### Источники и литература

- 1 Singer S J and Nicolson G L 1972 The fluid mosaic model of the structure of cell membranes *Science* 175 720-31
- 2 Li S, Du L, Wei Z and Wang W 2017 Aqueous-phase aerosols on the air-water interface: Response of fatty acid Langmuir monolayers to atmospheric inorganic ions *Sci. Total Environ.* 580 1155–61
- 3 Khomutov G, Bykov I, Gainutdinov R, Polyakov S, Sergeyev-Cherenkov A and Tolstikhina A 2002 Synthesis of Ni-containing nanoparticles in Langmuir-Blodgett films *Coll. and Surf. A: Physchem. and Eng. Asp.* 198 559-67
- 4 Chumakov A, Al-Alwani A J, Ermakov A, Shinkarenko O, Begletsova N, Glukhovskoy E and Santer S 2018 The Formation of arachidic acid Langmuir monolayers on the NiCl<sub>2</sub> solution *J. of Phys.* 1124 081009
- 5 M A Kremennaya, V Yu Lysenko, N N Novikova, S N Yakunin, A V Rogachev and G E Yalovega 2021 X-ray spectral diagnostics of the local environment of zinc in the arachidic acid layers *J. of Phys.: Conf. Ser.* 2103. 012171.