



**Конкурс работ молодых ученых «Просто о сложном»
Научно-популярная статья призера III степени Лебедевой Инны
Олеговны (заместителя директора по научно-методической работе
ГБОУ лицей № 623, аспирантки 4 г/о Санкт-Петербургского
политехнического университета Петра Великого, г. Санкт-Петербург)**

**Почему амфифильным макромолекулам лучше держаться вместе,
или Пару слов о мицеллообразовании¹**

Наверное, каждый человек, даже совсем далекий от чего бы то ни было научного, хоть раз сталкивался с термином «мицелла». Мицеллы преподносят как некие волшебные частицы, которые вам и косметику щадяще смоят, и качество пищи улучшат, и новейшие лекарства адресно доставят в любую точку организма в первозданном виде. Только вот возникает резонный вопрос – а что они вообще представляют собой, и почему эти самые мицеллы такие разные?

Начать следует с того, из чего именно и почему они образуются. Существуют такие молекулы, части которых имеют качественно разные свойства по отношению к окружающей их среде. Самым простым примером является история, когда молекула представлена двумя ковалентно связанными частями, при этом одна часть молекулы является гидрофильной, и так и жаждет вступить во взаимодействие с водой, а другая часть молекулы является гидрофобной, и всячески старается этого взаимодействия избежать. Оказавшись в водной среде, молекуле необходимо каким-то образом удовлетворить потребности обеих частей, при этом мимоходом не нарушив никаких законов мироздания.

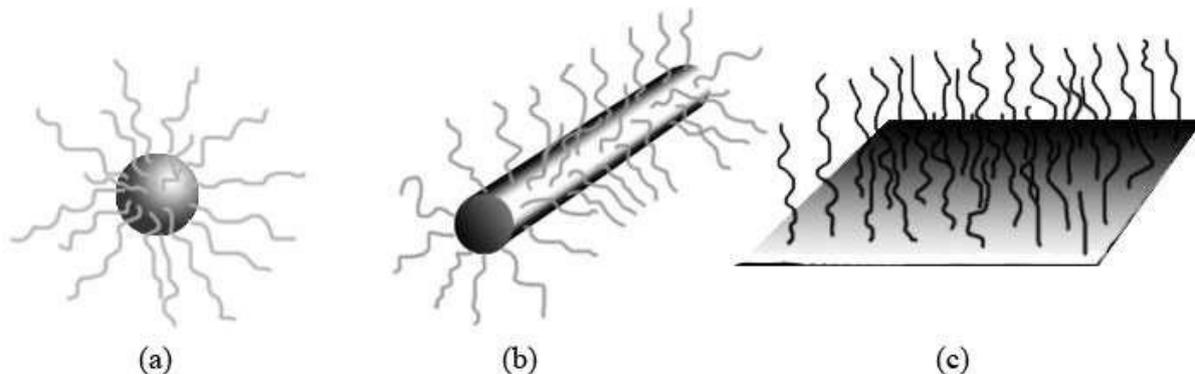
Как известно, любая система стремится к минимуму свободной энергии. Именно за счет этого молекула «определяет», выгоднее ли ей остаться в гордом одиночестве, или следует создать некий стабильный агрегат – мицеллу. И, разумеется, всегда существуют «за» и «против». Очевидно, что аргументом «против» будут выступать потери трансляционной энтропии – в системе возникло что-то упорядоченное. Однако в случае, если энергетический «выигрыш» оказывается более весомым, и происходит мицеллообразование.

Образование мицеллы – это результат тонкого баланса между силами притяжения и отталкивания. Гидрофобные части нескольких амфифильных молекул компактно упаковываются, вместе образуя гидрофобное ядро мицеллы, в то время как их гидрофильные части оказываются обращенными наружу, к окружающей водной среде, и формируют стабилизирующую агрегат корону. Число молекул, входящих в состав мицеллы, также не является случайным, является одним из важнейших параметров системы.

¹ Научно-популярная статья основана на материалах публикаций:

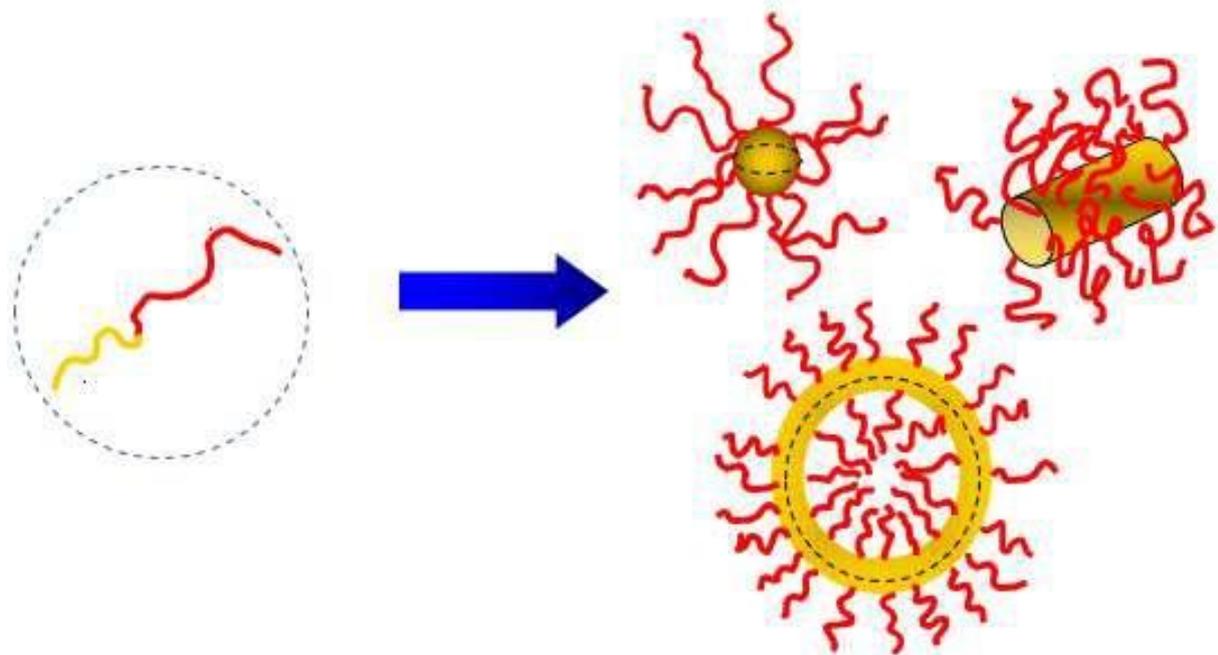
1. Lebedeva, I. O., Zhulina, E. B., & Borisov, O. V. (2019). Self-Assembly of Linear-Dendritic and Double Dendritic Block Copolymers: From Dendromicelles to Dendrimersomes. *Macromolecules*, 52(10), 3655-3667.
2. Lebedeva, I. O., Zhulina, E. B., & Borisov, O. V. (2018). Theory of Linear-Dendritic Block Copolymer Micelles. *ACS Macro Letters*, 7(1), 42-46.
3. Lebedeva, I. O., Zhulina, E. B., Leermakers, F. A., & Borisov, O. V. (2017). Dendron and hyperbranched polymer brushes in good and poor solvents. *Langmuir*, 33(5), 1315-1325.
4. Lebedeva, I. O., Zhulina, E. B., & Borisov, O. V. (2017). Self-consistent field theory of polyelectrolyte brushes with finite chain extensibility. *The Journal of chemical physics*, 146(21), 214901.
5. Lebedeva, I. O., Shavykin, O. V., Neelov, I. M., Zhulina, E. B., Leermakers, F. A., & Borisov, O. V. (2019). Non-linear elasticity effects and stratification in brushes of branched polyelectrolytes. *The Journal of Chemical Physics*, 151(21), 214902.

Минимальное число блок-сополимеров, входящих в состав стабильного агрегата, называется агрегационное число, которое соответствует минимуму свободной энергии в расчете на 1 молекулу.



*Рис. 1. Схематическое представление
а) сферических, б) цилиндрических, с) ламеллярных мицелл*

Говоря о мицелле, мы чаще всего представляем сферический агрегат, хотя это только одна из возможных форм. Могут возникать цилиндрические (червеобразные, нитеобразные) мицеллы, которые будут иметь протяженное ядро в форме цилиндра, окруженное соответствующей короной, и различные агрегаты, имеющие структуру, приближенную к плоскости: ламели, полимеросомы и т.д.



*Рис. 2 Самоорганизация амфифильных блок-сополимеров (схематическое изображение)
в мицеллы различной морфологии.
Желтым обозначены гидрофобные части, красным – гидрофильные.*

Форма возникающего агрегата также не является случайной. Она строго определена свойствами исходных гидрофильных и гидрофобных «блоков», их архитектурой, молекулярной массой и пр.

Понимание этого позволяет ученым, зная исходные параметры конкретной амфифильной макромолекулы, довольно точно предсказывать, какие именно мицеллы (по форме, агрегационному числу) из нее образуются. Но резонно возникает вопрос: а так ли это важно?

Любая практическая задача, которую стремятся решить исследователи с применением мицелл, ставит очень жесткие требования по отношению к ним. Так, сейчас очень активно ведутся исследования в области адресной доставки лекарств к конкретным тканям при помощи мицелл. Идея проста, как все гениальное – гидрофобное лекарство надежно «упаковывается» в ядро мицеллы, надежно защищенное гидрофильной короной, которая позволяет агрегату вполне комфортно себя чувствовать в водной среде организма. Но для того, чтобы доставить его точно по адресу, т.е. именно в ту ткань, где оно должно работать, нужно соблюсти ряд условий: сферическая форма агрегата и его небольшой размер (чтобы использовать собственные механизмы доставки веществ в организме), а также дополнительное декорирование гидрофильных частей молекул целевыми лигандами, соединениями, которые позволят доставить лекарство «строго по адресу». Построение точной теоретической вполне эффективно может предсказать, какой агрегат мы получим из определенных молекул. И, скорее всего, скоро мы, выполнив теоретические расчеты, будем заранее синтезировать молекулы строго определенной структуры, позволяющей использовать из максимально эффективно.