

## **Polyelektrolyttien vuorovaikutukset suolaliuoksissa – kohti tehokkaampaa geeniterapiaa?**

**Väitöskirjan nimi: Simulations of Polyelectrolyte Interactions in Salt**

### **Väitöskirjan sisältö**

Sähköisesti varatut polymeerit eli polyelektrolyytit (PE) ovat sekä monipuolisia synteettisiä materiaaleja että luonnossa esiintyviä makromolekyylejä. Biomolekyyleistä tärkein polyelektrolyytti on ihmisen geeniperimän sisältävä DNA. Monet PE:n ominaisuudet perustuvat vastakkaisesti varattujen polymeerien muodostamille komplekseille. Esimerkiksi ohutkalvot koostuvat jopa sadoista vastakkaisvarauksista polymeerikerroksista. Geeniterapissa taas negatiivisesti varattu DNA paketoidaan positiivisesti varattuun kantajamolekyylin. PE-kompleksissa positiivinen ja negatiivinen varaus vetävät toisiaan luontaisesti puoleensa. Tämä ominaisuus on kuitenkin herkkä ylimääräisten ionien eli suolan läsnäololle liuoksessa.

Väitöstutkimus selvitti tietokonemallinnuksen avulla polyelektrolyttien vuorovaikutuksia liuoksissa, jotka sisältävät mikroioneja eli suolaa. Kävi ilmi, että mikroionit purkavat PE:n väliset sidokset vetoketjumaisesti eli korvaamalla PE-PE-sidokset mikroioni-PE-sidoksilla yksi kerrallaan. Polyelektrolyttien varaustiheyksien suhde vaikuttaa purkautumiseen. Työssä löydettiin kaksi mekanismia, joilla positiivisesti ja negatiivisesti varatun polymeerin välinen vuorovaikutus voidaan suolaliuoksissa kääntää hylkiväksi.

Geeniterapiassa hyvä kantajamolekyylin tarjoaa DNA:lle riittävän suojan matkalla soluun. Jotta DNA:n sisältämä geneettinen koodi saadaan luettua, pitää kantajan osata vapauttaa DNA solun sisällä oikealla hetkellä. Työssä näytettiin kuinka kantajamolekyylin varauksen säätely vaikutti DNA:n vapautumiseen suolaliuoksessa. Tulokset auttavat geeniterapian kantajamolekyylin suunnittelussa.

Tuloksista on hyötyä myös polyelektrolyyteistä koostuvien monikerrosrakenteiden suunnittelussa. Havaittu vetoketjumainen purkautuminen auttaa selittämään suolakonsentraation vaikutuksen kerrosrakenteiden kasvatusnopeuteen ja stabiilisuuteen. Monikerrosrakenteita voidaan hyödyntää esimerkiksi metallien päällystämässä vaikkapa antimikrobisuuden saavuttamiseksi.