

О.Д. СТОЛЯРИК,¹ А.А. ГУСЛІСТИЙ,² О.В. ХОРОЛЬСЬКИЙ³

¹ Одеський національний університет імені І.І. Мечникова
(Вул. Дворянська, 2, Одеса 65026; e-mail: adiabata384@gmail.com)

² Центр сімейної медицини “Амедика”
(Вул. Семена Палія, 103-Б, Одеса 65123; e-mail: aguslisty@gmail.com)

³ Полтавський національний педагогічний університет імені В.Г. Короленка
(Вул. Остроградського, 2, Полтава 36003; e-mail: khorolskiy.alexey@gmail.com)

ТЕМПЕРАТУРНА І КОНЦЕНТРАЦІЙНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ДЗЕТА-ПОТЕНЦІАЛУ МАКРОМОЛЕКУЛ АЛЬБУМІНУ У ВОДНО-СОЛЬОВОМУ РОЗЧИНІ ЗГІДНО З КОМІРКОВОЮ МОДЕЛЛЮ

УДК 532.13, 577.322.3,
577.356

За допомогою коміркової моделі побудовано концентраційні залежності дзета-потенціалу сироваткового альбуміну людини у водно-солевих розчинах; знайдено теоретичні залежності дзета-потенціалу водно-солевих розчинів сироваткового альбуміну людини від концентрації хлориду натрію для різних концентрацій альбуміну: а) за двох різних температур, 300 К та 318 К; б) за різних значень радіуса альбуміну, 40 Å та 45 Å. Виявлено, що зміна температури в розглянутих межах суттєво не впливає на дзета-потенціал водно-солевих розчинів альбуміну; збільшення радіуса молекули на 5 Å приводить до помітного зменшення дзета-потенціалу від 3 до 10 одиниць в залежності від концентрації солі. Отримані дані є базисом для інтерпретації значень дзета-потенціалу альбуміну за наявності різних патологічних станів.

Ключові слова: водний розчин, альбумін, хлорид натрію, дзета-потенціал, рН, коміркова модель.

1. Вступ

Темою роботи є дослідження електрофізичних властивостей макромолекул сироваткового альбуміну людини у водно-солевих розчинах. Приймається, що сироватковий альбумін – це глобулярний

протеїн, що є однією з головних складових плазми крові [1–3].

Альбумін становить більшу частину (63–65 мас.%) від усіх протеїнів плазми крові [1]. Решту складають глобуліни (36,8 мас.%) та фібриноген (0,4 мас.%). Крім того у плазмі крові присутні ліпіди, жирні кислоти, холестерин тощо. Серед неорганічних речовин до складу плазми крові входять солі: хлориди натрію, калію, магнію та інші, – їх загальна кількість становить близько 10 г/л. Альбумін є головним протеїном, відповідальним за кілька важливих функцій крові: транспортну, регуляторну та накопичувальну [2].

Згідно з [1], сироватковий альбумін людини – це глобулярний білок, який складається із послі-

Цитування: Столярик О.Д., Гуслістий А.А., Хорольський О.В. Температурна і концентраційна залежність дзета-потенціалу макромолекул альбуміну у водно-сольовому розчині згідно з комірковою моделлю. *Укр. фіз. журн.* **68**, № 11, 744 (2023).

Citation: Stoliaryk O.D., Guslisty A.A., Khorolskiy O.V. Temperature and concentration dependences of the zeta potential of albumin macromolecules in the aqueous-salt solution. *Ukr. J. Phys.* **68**, No. 11, 742 (2023). <https://doi.org/10.15407/ujre68.11.742>.

довності 585 амінокислот в одному поліпептидному ланцюзі довжиною 350 Å; формує вторинну (альфа-спіралі), третинну та четвертинну структуру – складається з трьох доменів, у кожному домені виділяють два субдомени. Вторинна структура молекули зумовлена формуванням водневих зв'язків між окремими частинами ланцюга. Третинна та четвертинна структури зумовлені наявністю водневих зв'язків, дисперсійною та електростатичною взаємодією між окремими частинами молекули. У конденсованому стані макромолекула має неправильну серцевидну форму, що можна усереднено представити у вигляді трикутної призми розмірами $80 \times 80 \times 80 \times 30 \text{ Å}^4$. Альбумін характеризується доброю розчинністю у воді та водно-солевих розчинах.

При потраплянні макромолекули альбуміну у водний розчин відбувається взаємодія бічних частин амінокислотних залишків макромолекули з молекулами води та приєднання або втрата макромолекулою катіонів водню. Враховуються тільки ті амінокислотні залишки, які знаходяться поблизу поверхні макромолекули альбуміну. При цьому аспарагінова та глутамінова амінокислоти на поверхні молекули альбуміну втрачають катіони водню, в той час як гістидин, лізин та аргінін – приєднують їх. Ці процеси призводять до формування поверхневого заряду та дифузійного електричного шару (разом з іонами солі) навколо макромолекули, а також до зміни важливої властивості розчину – водневого показника рН [4–9].

Під час руху молекули подвійний електричний шар частково руйнується, місце розриву подвійного електричного шару називають площиною ковзання. Дзета-потенціалом називають потенціал молекули на площині ковзання. Величиною дзета-потенціалу визначається здатність молекули приєднувати та транспортувати молекули лікарських речовин, гормонів тощо [6–14].

У розбавлених розчинах розподіл потенціалу навколо ізольованої макромолекули знаходиться в наближенні Дебая [15]. Згідно з результатом роботи [14], створений молекулою потенціал експоненційно спадає при віддаленні від неї. Ефективна товщина електричного шару навколо макромолекули альбуміну визначається радіусом Дебая r_D [16, 17].

На відстанях між молекулами альбуміну $r > 2(r_a + r_D)$ їх взаємодією можна знехтувати (тут

r_a – радіус альбуміну). За більш високих концентрацій альбуміну, коли відстань між центрами молекул альбуміну задовольняє нерівності $r < 2(r_a + r_D)$ дифузійні шари сусідніх макромолекул перекриваються, і розподіл потенціалу, а також значення дзета-потенціалу, суттєво змінюється. Розподіл потенціалу суттєво змінюється також внаслідок впливу всіх інших протеїнів у плазмі: загальний об'єм, який займають протеїни (окрім альбуміну), за порядком величини дорівнює загальному фракційному об'ємові макромолекул альбуміну. У цьому випадку треба переходити до нового методу розрахунку дзета-потенціалу, який у літературі відомий під назвою коміркової моделі [18, 19].

Коротко зупинимось на значеннях концентрації, які відповідають областям застосування дебаєвської та коміркової моделей. У західній літературі загальноприйнятим є використання двох термінів: масова густина ρ і чисельна густина $n = \rho/m_0$, де m_0 – маса молекули. Ми будемо використовувати означення чисельної густини n як числа молекул в одиниці об'єму. Не важко переконатися, що максимально щільній упаковці макромолекул альбуміну відповідає його мольна частка $c_M = n_a/n_w \approx 6 \cdot 10^{-5}$, де $n_a = 3/(8\pi r_a^3)$ – значення чисельної густини альбуміну за максимальної упаковки, n_w – чисельна густина молекул води у розчині. Зазначимо, що тут і надалі ми будемо використовувати наближене означення мольної частки, оскільки $n_a \ll n_w$.

Середня відстань між центрами макромолекул альбуміну в плазмі крові знаходиться на рівні $\langle r_{12} \rangle \approx 4r_a$. Якби в крові були тільки макромолекули альбуміну, то можна було б обмежитись дебаєвським наближенням. Але суттєво більше за об'ємом макромолекули γ -глобуліну та фібриногену порушують рівновіддалене розташування макромолекул альбуміну й умови застосування дебаєвського наближення (див. рис. 1). У цьому випадку більш адекватного опису можна досягти за допомогою коміркової моделі (див. [18, 19]).

Важливим питанням медицини та біофізики є з'ясування залежності дзета-потенціалу макромолекули від водневого показника рН розчину, а також одночасна залежність дзета-потенціалу і рН від концентрації солі. Відповідь на перше питання отримано в роботі [20], де показано, що при значеннях $\text{pH} < \text{pH}_e$ дзета-потенціал приймає позитивні значення, а при $\text{pH} > \text{pH}_e$ – негативні значення.

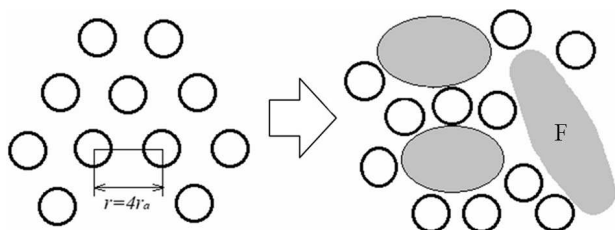


Рис. 1. Модельне представлення розташування макромолекул альбуміну (кружечки) у водному розчині альбуміну, та у плазмі крові: *затемнені кружечки* зображають макромолекули γ -глобуліну, а фігура F – макромолекулу фібриногену

Значення pH_e є значенням водневого показника в ізоелектричній точці, де дзета-потенціал змінює свій знак. На жаль, залежність дзета-потенціалу та pH від концентрації солі досліджена не достатньо детально. Перші результати були отримані в роботі [21].

Метою даної роботи є: 1) побудова коміркової моделі для водного розчину сироваткового альбуміну людини; 2) теоретичний розрахунок заряду молекули альбуміну у розчині як функції водневого показника pH ; 3) знаходження дзета-потенціалу макромолекули як функції чисельної густини макромолекул альбуміну та солі, температури та показника pH ; 4) аналіз теоретичної концентраційної та температурної залежності дзета-потенціалу макромолекул альбуміну.

2. Застосування наближення Дебая для розбавлених водно-солевих розчинів альбуміну

Спершу розглянемо розбавлений водний розчин альбуміну, коли вплив однієї молекули на іншу є несуттєвим. Для оцінки дзета-потенціалу в цьому випадку застосуємо рівняння Дебая з усіма тими наближеннями, які звичайно використовуються [16–19].

Потенціал поля задовольняє рівняння Пуассона:

$$\Delta\varphi = -\frac{4\pi\rho}{\varepsilon}, \tag{1}$$

де ε – дійсна частина ефективної діелектричної проникності електроліту на нульовій частоті. Об'ємна густина заряду визначається виразом:

$$\rho(r) = -\frac{1}{4\pi r_D^2} \varphi. \tag{2}$$

На поверхні цієї сферичної частинки враховуємо граничну умову для потенціалу:

$$\left. \frac{\partial\varphi(r)}{\partial r} \right|_{r=r_p} = 4\pi\sigma, \tag{3}$$

де σ – поверхнева густина заряду. Друга гранична умова є стандартною:

$$\varphi(r) \rightarrow 0, \quad r \rightarrow \infty. \tag{4}$$

Потенціал, який задовольняє сформульовані граничні умови представляється у вигляді:

$$\varphi(r) = \varphi_0(r_a) f(r), \tag{5}$$

де

$$\varphi_0(r_a) = \frac{4\pi\sigma r_a r_D}{\varepsilon(r_a + r_D)} \tag{6}$$

потенціал, утворений зарядженою поверхнею в її околі, а

$$f(r) = \frac{r_a}{r} \exp\left(-\frac{r - r_a}{r_D}\right) \tag{7}$$

функція, яка описує зменшення потенціалу з віддаленням від поверхні альбуміну. Якщо n_{Na} – чисельна густина іонів натрію, то радіус Дебая, що відповідає ефективній товщині дифузійного шару:

$$r_D = \left(\frac{\varepsilon k_B T}{8\pi e^2 n_{Na}}\right)^{1/2}. \tag{8}$$

Дзета-потенціал визначається різницею потенціалів між поверхнею і нескінченно віддаленою точкою. Згідно з (5), дзета-потенціал дорівнює:

$$\zeta = \varphi_0(r_a). \tag{9}$$

Згідно з результатами досліджень дзета-потенціалу в роботах [22–25], поверхневий заряд макромолекули альбуміну знаходиться в межах $(15-50)e$, де e – заряд електрона. У подальших розрахунках дзета-потенціалу будемо вважати поверхневий заряд альбуміну у розчині сталою величиною, рівною $18e$, що відповідає заряду альбуміну при фізіологічному значенні pH крові людини [2, 22, 24].

На рис. 2 наведено залежність дзета-потенціалу макромолекул альбуміну від густини йонів у розчині, отриману у наближенні Дебая при $T = 300$ К.

Із отриманої залежності видно, що зі збільшенням числа йонів у розчині дзета-потенціал альбуміну спадає до нуля, що відповідає повному екрануванню заряду макромолекули.

3. Побудова коміркової моделі

Для того, щоб знайти дзета-потенціал макромолекули альбуміну, скористаємося методом, який був запропонований у роботах [18, 19] для опису електричних властивостей пилової плазми. Згідно з дослідженням [25], молекула альбуміну у розчині набуває форму, яка залежить від показника рН та за значення показника рН понад 6 може бути наближено апроксимована формою еліпсоїда. Таким чином, маємо молекулу неправильної форми, що має нерівномірний розподіл заряду. Оскільки молекула альбуміну в розчині має велику швидкість обертання, її форму можна наближено вважати сферичною, та оцінити середню поверхневу густину заряду (див. рис. 3).

При потраплянні молекули альбуміну у розчин відбувається перерозподіл електричних зарядів на поверхні молекули та у розчині. Навколо молекули утворюється хмара позитивних і негативних зарядів, що шарами замінюють один одного – подвійний електричний шар. Останній екранує повністю заряд молекули. Тому на деякій відстані від зарядженої частинки потенціал поля дорівнюватиме нулю. Таким чином, усю систему можна розбити на сукупність однакових областей – комірок, на межах яких потенціал електричного поля дорівнює нулю (див. рис. 4).

Знайдемо потенціал поля всередині комірки як функцію відстані від молекули альбуміну.

Радіус комірки визначається із умови, що об'єм комірки дорівнює фракційному об'єму на одну домішкову частинку альбуміну:

$$r_D = \left(\frac{3}{4\pi n_p} \right)^{1/3}. \quad (10)$$

Для даної моделі використаємо припущення, цілком аналогічні наближенню Дебая (1)–(4). На межі комірки потенціал поля дорівнює нулю, що є першою граничною умовою:

$$\varphi(r)|_{r=r_c} = 0. \quad (11)$$

Потенціал поля на поверхні молекули задовольняє умову:

$$\left. \frac{\partial \varphi(r)}{\partial r} \right|_{r=r_p} = 4\pi\sigma. \quad (12)$$

де r_p – радіус молекули альбуміну у розчині.

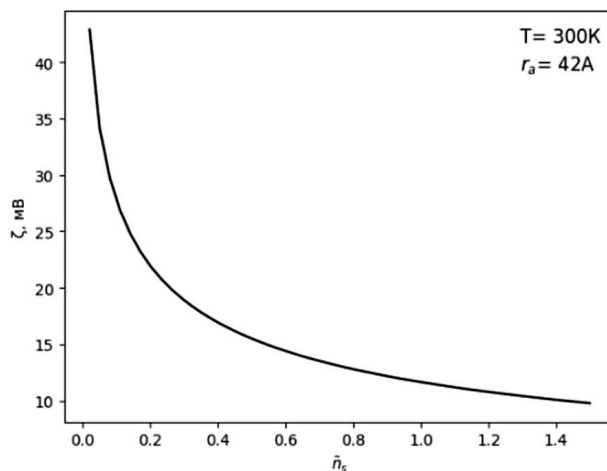


Рис. 2. Залежність дзета-потенціалу макромолекул альбуміну від нормованої густини йонів солі у розчині, отриману у наближенні Дебая при $T = 300$ К

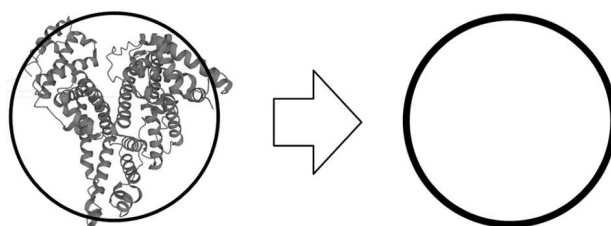


Рис. 3. Модельне представлення макромолекули альбуміну у вигляді сфери

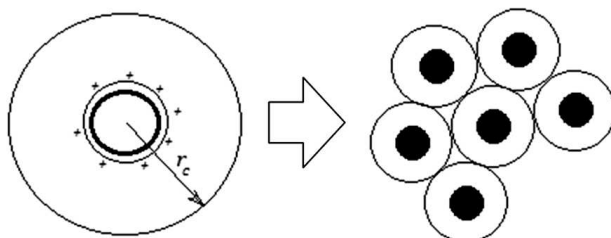


Рис. 4. Розбиття системи на сукупність однакових комірок

Розв'язок диференціального рівняння (1) з граничними умовами (11)–(12) має вигляд:

$$\varphi(r) = \varphi_0(r_a)f(r), \quad (13)$$

$$\varphi_0(r_a) = \frac{4\pi\sigma}{\varepsilon} \frac{r_a r_D \sinh \frac{r_c - r_a}{r_D}}{r_a \cosh \frac{r_a - r_c}{r_D} - r_D \sinh \frac{r_a - r_c}{r_D}}, \quad (14)$$

$$f(r) = \frac{r_a}{r} \frac{\sinh \frac{r_c - r}{r_D}}{\sinh \frac{r_c - r_a}{r_D}}. \quad (15)$$

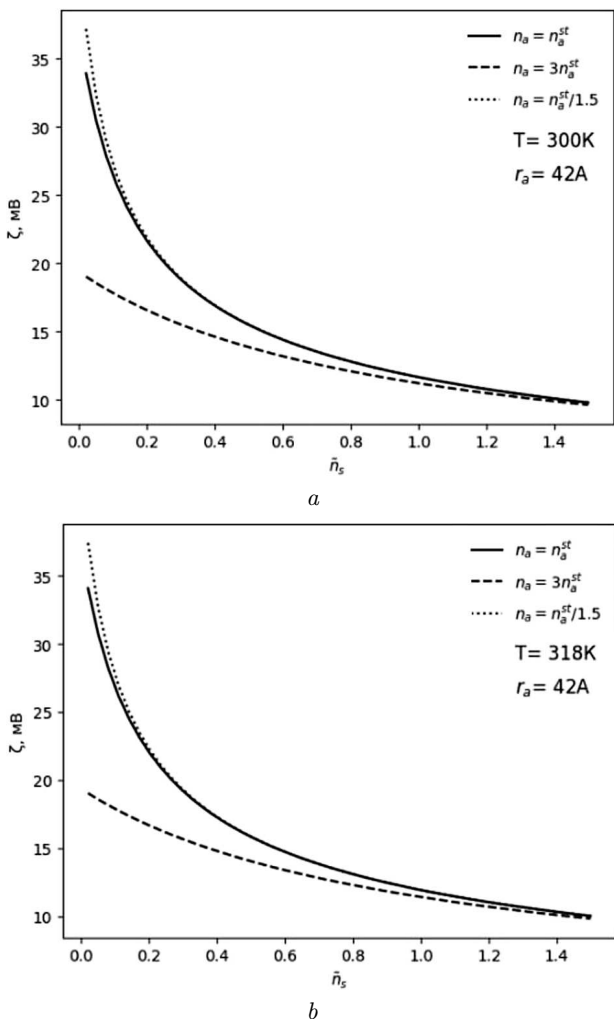


Рис. 5. Залежності дзета-потенціалів водного розчину молекул альбуміну від нормованої густини йонів солі при температурі $T = 300\text{ K}$ (а) та при $T = 318\text{ K}$ (б)

Усереднені значення об'ємних концентрацій основних груп білків плазми крові

Основні групи білків плазми крові	Об'ємна концентрація, ω_i	Сумарна об'ємна концентрація, ω
Альбумін	0,12	0,25
α_1 -глобулін	0,0068	
α_2 -глобулін	0,0156	
β -глобулін	0,0116	
γ -глобулін	0,0518	
Фібриноген	0,034	

Оскільки за означенням дзета-потенціалу

$$\zeta = \varphi(r_a) - \varphi(r_c), \tag{16}$$

а $\varphi(r_c) = 0$, то дзета-потенціал буде визначатися потенціалом на поверхні молекули альбуміну:

$$\zeta = \varphi_0(r_a) = \frac{4\pi\sigma}{\varepsilon} \frac{r_a r_D \sinh \frac{r_c - r_a}{r_D}}{r_a \cosh \frac{r_a - r_c}{r_D} - r_D \sinh \frac{r_a - r_c}{r_D}}. \tag{17}$$

Дзета-потенціал є функцією тих самих параметрів, які впливають на поведінку радіуса Дебая, а також від заряду на поверхні частинки (поверхневої густини заряду) і діелектричної проникності води.

4. Обговорення поведінки дзета-потенціалу у водно-солевих розчинах альбуміну в залежності від їх параметрів

Для ілюстрації впливу обмежень, які накладаються комірковою моделлю, розглянемо залежність дзета-потенціалу від концентрацій альбуміну та солей. Як відомо [1, 2], альбумін у плазмі крові становить більшу частину (63–65 мас.%) усіх білків плазми крові. Решту складають глобуліни (36,8 мас.% усіх білків) та фібриноген (0,4 мас.%). Глобуліни у плазмі крові виділено у трьох фракціях: α , β і γ -глобуліни. Об'ємні концентрації білків плазми наведені у таблиці.

До складу плазми крові входять такі солі: 1) NaCl, мольна частка дорівнює: $c_{\text{NaCl}} \approx n_{\text{NaCl}}/n_w = 2,6 \cdot 10^{-3}$, де n_{NaCl} і n_w – чисельні густини хлориду натрію і води у водному розчині; 2) KCl, $c_{\text{KCl}} = 9 \cdot 10^{-5}$; 3) CaCl₂, $c_{\text{CaCl}_2} = 4,55 \cdot 10^{-5}$; 4) MgSO₄, $c_{\text{MgSO}_4} = 1,82 \cdot 10^{-5}$; 5) NaHCO₃, $c_{\text{NaHCO}_3} = 5 \cdot 10^{-4}$.

Як бачимо, домінуючий вплив на властивості плазми крові спричинює хлорид натрію, оскільки його вміст перевищує 80% від загальної кількості солей плазми крові. Тому в наших розрахунках ми будемо обмежуватись тільки кількістю хлориду натрію. Для подальшого опису вмісту солі у розчині використаємо нормоване значення чисельної густини, яке задається відношенням густини солі до її стандартного значення в плазмі крові $\tilde{n}_s = n_s/n_s^{(st)}$, де $n_s^{(st)} = 1,022 \cdot 10^{20}\text{ см}^{-3}$ – чисельна густина солі, що відповідає вмісту в плазмі крові здорової людини. Густина альбуміну описується

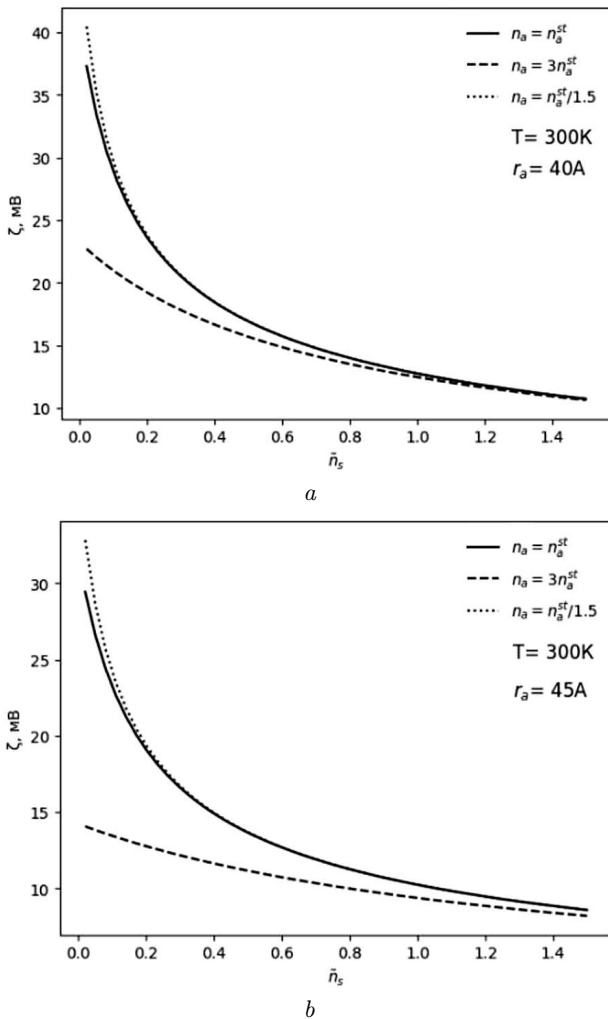


Рис. 6. Залежності дзета-потенціалу молекул альбуміну від нормованої густини йонів солі при радіусі альбуміну 40 Å (а) та при 45 Å (b)

аналогічно $\tilde{n}_a = n_a/n_a^{(st)}$, де стандартне значення дорівнює $n_a^{(st)} = 4,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

На рис. 5 наведена поведінка дзета-потенціалу в залежності від нормованої густини \tilde{n}_s хлориду натрію та за різних чисельних густин n_a альбуміну: рис. 5, а відповідає температурі $T = 300 \text{ K}$, рис. 5, б – температурі $T = 318 \text{ K}$. З отриманих теоретичних залежностей можна зробити висновок, що зміна температури на 10–20 K майже ніяк не позначається на концентраційних залежностях дзета-потенціалу альбуміну.

У роботах [26, 27] показано, що розмір молекул альбуміну залежить від водневого показни-

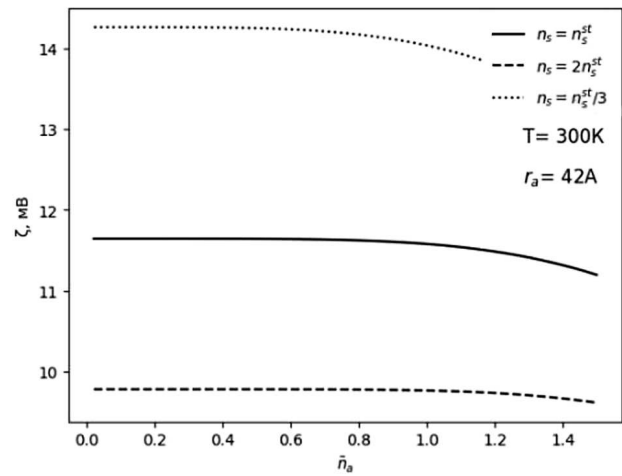


Рис. 7. Залежності дзета-потенціалу молекул альбуміну від нормованої густини альбуміну при різних значеннях чисельної густини йонів солі

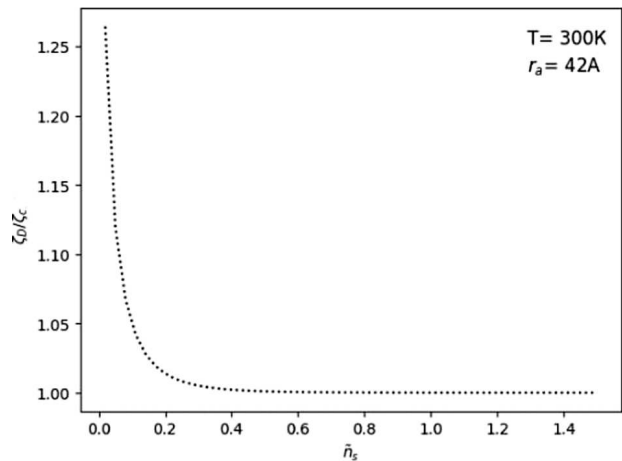


Рис. 8. Залежність відношення ζ_D/ζ_c від нормованої густини солі

ка рН та концентрації альбуміну. Вплив розміру макромолекули альбуміну аналізується на рис. 6: рис. 6, а відповідає радіусу альбуміну 40 Å, а рис. 6, б – 45 Å.

Як бачимо, значення дзета-потенціалу: 1) суттєво зростає із зменшенням густини альбуміну ($\zeta = 16 \text{ мВ}$ при $\tilde{n}_a = 1,5$, $\zeta = 40 \text{ мВ}$ при $\tilde{n}_a = 1/3$ при $r_a = 42 \text{ Å}$, тобто $\Delta\zeta \approx 23\text{--}24 \text{ мВ}$, при збільшенні радіуса альбуміну на 2–3 Å різниця $\Delta\zeta$ залишається тією самою); 2) зменшуються із зростанням густини хлориду натрію (від 25 мВ до 12 мВ за стандартної густини альбуміну та $r_a = 42 \text{ Å}$); помічаємо, що зі збільшенням густини альбуміну

вплив солі на дзета-потенціал стає менш суттєвим; 3) з аналізу рис. 7 випливає, що вплив густини альбуміну стає менш помітним зі збільшенням густини солі; 4) при збільшенні радіуса альбуміну (в нашому випадку – на 5 Å) розчину макромолекул альбуміну дзета-потенціал зменшується на 8–9 одиниць – при всіх значеннях густини альбуміну та $\tilde{n}_s = 0,01$; при збільшенні густини солі \tilde{n}_s зміна ζ при зменшенні радіуса стає все менш суттєвою; 5) практично не залежать від значень температури: зміна дзета-потенціалу має порядок близько $\approx 10^{-1} - 10^{-2}$ мВ.

Наостанок розглянемо відношення дзета-потенціалів для моделі Дебая ζ_D до дзета-потенціалів у комірковій моделі ζ_c як функцію нормованої густини солі \tilde{n}_s . Вважається, що ζ_D і ζ_c визначаються формулами (9) та (17) відповідно. Графік залежності $\zeta_D/\zeta_c = f(\tilde{n}_s)$ наведено на рис. 8. Як і повинно бути, для достатньо концентрованого розчину солі це відношення прямує до одиниці. І тільки при густинах $\tilde{n}_s < 0,4$ спостерігаються суттєві відхилення від одиниці. Ця обставина є дуже важливою для інтерпретації експериментальних даних для значень дзета-потенціалу.

5. Висновки

Вимірювання дзета-потенціалу дає нам інформацію а) про величину заряду на поверхні макромолекули альбуміну та б) про параметри дифузійного шару. Саме тому варто ретельно досліджувати залежність дзета-потенціалу від концентрації альбуміну і концентрації йонів солі, та знати їх середні значення для конкретного організму. Відхилення дзета-потенціалу від середнього значення буде свідчити про зміну концентрації йонів і концентрації альбуміну.

Потрібно враховувати, що експериментальні вимірювання дзета-потенціалу дають нам інформацію не тільки про альбумін, а також про розподіл зарядів у інших компонентах плазми – фібриногені та глобулінах.

Дослідження дзета-потенціалу дає певні уявлення про локальні характеристики плазми крові, такі як водневий показник рН та концентрація альбуміну в судинах.

Вимірювання дзета-потенціалу дає можливість виявляти мінімальну концентрацію тих протейнів, які з'являються тільки в патологічних станах ор-

ганізму (гематологічні захворювання, мікроглобулінемія Вальденстрема, лейкози та аутоімунні захворювання). Також ці вимірювання можуть дати вагомий внесок у ранню діагностику цілої низки аномалій генетичного апарату.

Автори роботи висловлюють глибоку подяку академіку Леоніду Анатолійовичу Булавину за постійну підтримку роботи та стимулювання її виконання. Нам хотілося б щиро подякувати професору М.П. Маломужу за допомогу у вирішенні поставлених завдань та за обговорення отриманих результатів.

1. V.W. Rodwell, D.A. Bender, K.M. Botham, P.J. Kennelly, P.A. Weil. *Harper's Illustrated Biochemistry* (McGraw Hill, 2018) [ISBN: 978-1259837937].
2. И.В. Савицкий. *Биологическая химия* (Вища школа, 1982).
3. Э.М. Трухан. *Введение в биофизику* (МФТИ, 2008) [ISBN: 9785741702406].
4. R.G. Bates. *Determination of pH: Theory and Practice* (John Wiley and Sons, 1964) [ISBN: 9780471056461].
5. V. Bardik, A.I. Fisenko, S. Magazù, N.P. Malomuzh. The crucial role of water in the formation of the physiological temperature range for warm-blooded organisms. *J. Mol. Liq.* **306**, 112818 (2020).
6. N. Atamas, V. Bardik, A. Bannikova, O. Grishina, E. Lugovskoi, S. Lavoryk, Y. Makogonenko, V. Korolovych, D. Nerukh, V. Paschenko. The effect of water dynamics on conformation changes of albumin in pre-denaturation state: Photon correlation spectroscopy and simulation. *J. Mol. Liq.* **235**, 17 (2017).
7. N. Atamas, V. Bardik, S. Komisarenko, Y. Makogonenko, E. Lugovskoi, N. Malomuzh, D. Nerukh, P. Solonin. Water dynamics and stability of major blood proteins at pre-denaturation stage. *Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti: Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali* **97** (S2), A16 (2019).
8. Н.О. Мчедлов-Петросян, Ю.Э. Зевацкий, Д.В. Самойлов. *Физическая химия. Кислотно-основные равновесия в водных растворах* (СПб, 2018) [ISBN: 978-5-7937-1496-9].
9. Н.О. Мчедлов-Петросян, Л.П. Логинова, В.Н. Клещеникова. Влияние солей на ионизацию индикаторов в слое Штерна катионных мицелл. *ЖФХ* **67**, 1649 (1993).
10. O.V. Tomchuk, L.A. Bulavin, V.L. Aksenov, V.M. Garamus, O.I. Ivankov, A.Y. Vul', A.T. Dideikin, M.V. Avdeev. Small-angle scattering from polydisperse particles with a diffusive surface. *J. Appl. Crystall.* **47**(2), 642 (2014).
11. E.A. Kyzyma, A.A. Tomchuk, L.A. Bulavin, V.I. Petrenko, L. Almásy, M.V. Korobov, D.S. Volkov, I.V. Mikheev, I.V. Koshlan, N.A. Koshlan, P. Bláha, M.V. Avdeev, V.L. Aksenov. Structure and toxicity of aqueous fullerene C₆₀ solutions. *J. Surf. Invest. X-ray* **9**, 1 (2015).

12. V.I. Petrenko, O.P. Artykulnyi, L.A. Bulavin, L. Almásy, V.M. Garamus, O.I. Ivankov, N.A. Grigoryeva, L. Vekas, P. Kopcansky, M.V. Avdeev. On the impact of surfactant type on the structure of aqueous ferrofluids. *Colloid, Surface. A* **541**, 222 (2018).
13. A. Oleinikova, L. Bulavin, V. Pipich. Critical anomaly of shear viscosity in a mixture with an ionic impurity. *Chem. Phys. Lett.* **278**, 121 (1997).
14. С.С. Духин. *Электропроводность и электрокинетические свойства дисперсных систем* (Наукова думка, 1975).
15. К.В. Федорова. Оптические свойства макромолекул белков и ферментов в водных растворах, содержащих металлические ионы. *Дисс. ... канд. физ.-мат. н.: 01.04.05* (Москва, 2016).
16. П. Дебай. *Избранные труды* (Наука, 1987).
17. Л.Д. Ландау, Л.П. Питаевский, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Статистическая физика. Часть 1* (Наука, 1976).
18. В.И. Маренков, М.Н. Чесноков. *Физические модели плазмы с конденсированной дисперсной фазой* (УМК ВО, 1989).
19. V.E. Fortov, A.G. Khrapak, S.A. Khrapak, V.I. Molotkov, O.F. Petrov. Dusty plasmas. *Physics-Uspekhi* **47** (5), 447 (2004).
20. B. Jachimaska, M. Wasilewska, Z. Adamczyk. Characterization of globular protein solutions by dynamic light scattering, electrophoretic mobility, and viscosity measurements. *Langmuir* **24**, 6866 (2008).
21. V. Souza, A. Pires Ordine, I.C.S. Fraga, M.A. Getrouw, P.P. Borges, J.C. Damasceno, P.R.G. Couto. Effect of NaCl and HCl concentrations on primary pH measurement for the certification of standard materials. *Braz. Arch. Biol. Technol.* **49** (Special), 79 (2006).
22. N. Fogh-Andersen, P.J. Bjerrum, O. Siggaard-Andersen. Ionic binding, net charge, and Donnan effect of human serum albumin as a function of pH. *Clinical Chemistry* **39** (1), 48 (1993).
23. J.C. Bosma, J.A. Wesselingh. pH dependence of ion-exchange equilibrium of proteins. *AIChE Journal* **44** (11), 2399 (1998).
24. M. Mapiour, A. Abdelrasoul. Critical influences of plasma pH on human protein properties for modeling considerations: Size, charge, conformation, hydrophobicity, and denaturation. *J. Compos. Sci.* **7** (1), 28 (2023).
25. K. Baler, O.A. Martin, M.A. Carignano, G.A. Ameer, J.A. Vila, I. Szleifer. Electrostatic unfolding and interactions of albumin driven by pH changes: A molecular dynamics study. *J. Phys. Chem. B* **118**, 921 (2014).
26. O.V. Khorolskyi. Calculation of the effective macromolecular radii of human serum albumin from the shear viscosity data for its aqueous solutions. *Ukr. J. Phys.* **64** (4), 287 (2019).
27. O.V. Khorolskyi, Y.D. Moskalenko. Calculation of the macromolecular size of bovine serum albumin from the viscosity of its aqueous solutions. *Ukr. J. Phys.* **65** (1), 41 (2020).

Одержано 04.07.2023

O.D. Stoliaryk, A.A. Guslisty, O.V. Khorolskyi

TEMPERATURE AND CONCENTRATION
DEPENDENCES OF THE ZETA POTENTIAL
OF ALBUMIN MACROMOLECULES
IN THE AQUEOUS-SALT SOLUTION

Using the cellular model, the dependences of the zeta potential of human serum albumin on the salt concentration in aqueous NaCl solutions have been obtained for two temperatures, 300 and 318 K, and two values of albumin radius, 40 and 45 Å. It is found that the temperature variation within the considered interval does not significantly affect the examined parameter. An increase of the molecular radius by 5 Å leads to a noticeable reduction of the zeta potential from 3 to 10 units depending on the salt concentration. The obtained data can serve as a basis for interpreting the values of the albumin zeta potential under various pathological conditions.

Keywords: aqueous solution, albumin, sodium chloride, zeta potential, pH, cellular model.