**Компьютерное моделирование комплексов кольцевых СНП-ПАВ**

***Жолудев С.И., 1 Петровский В.С. 1***

*Аспирант, 1 год обучения*

*1Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*

*физический факультет, Москва, Россия*

*E–mail: zholudev@polly.phys.msu.ru*

Разработка шовных материалов для клинического применения является важной задачей полимерной науки, сохраняющей актуальность по сей день. Это связано с тем, что клеи, успешно выполняющие схожие задачи в других областях человеческой деятельности, не подходят для биомедицинского приложения, поскольку в этом случае необходима не только хорошая адгезия материала к поверхности, но также - биоразлагаемость и биосовместимость[1]. Решением данной задачи может стать выделение подходящих полипептидов из живых организмов, однако на данный момент этот подход оказывается технически сложным для реализации[2]. В качестве альтернативы напрашивается создание искусственных полипептидов, аминокислотная последовательность которых практически повторяет природные аналоги. В связи с этим интерес вызывают синтетические заряженные полипептиды, которые по аминокислотному составу близки к эластину и обладают структурой -Val-Pro-Gly-X-Gly, где X - лизин или валин[3]. Образование комплексов осуществляется за счёт добавления молекул додецилбензолсульфоната натрия. В ряде экспериментов такие комплексы сверхзаряженных несвернутых полипептидов (СНП) с поверхностно-активными веществами уже продемонстрировали отличную адгезию к поверхностям искусственного и естественного происхождения.

Данная работа направлена на изучение свойств (размера и формы) одиночных кольцевых полипептидов, а также их комплексов с ПАВ в водном растворе в зависимости от их длины и температуры раствора методом атомистического компьютерного моделирования при помощи пакета программ GROMACS. Кроме того, проведение силовых экспериментов, заключающихся в вытягивании одного из полипептидов из комплекса, применяется здесь для исследования изменения прочности комплекса в зависимости от длины полипептида и сравнения полученных данных с имеющимися результатами для линейных цепей соответствующей длины. Таким образом, основным итогом представляемой работы является получение информации о влиянии топологии сверхзаряженных несвернутых полипептидов (СНП) на свойства комплекса СНП-ПАВ, что не только вызывает интерес с точки зрения фундаментальной науки, но также имеет перспективу использования на практике при создании биосовместимого клея на их основе.

**Благодарность**

Авторы выражают благодарность профессору Потемкину И.И. Работа выполнена при поддержке грантов РНФ № 22-43-04417. Моделирование проводилось на суперкомпьютере Ломоносов 2 суперкомпьютерного комплекса Московского государственного университета.

**Литература**

1. Moad, G., Rizzardo, E., Thang, S.H. Toward living radical polymerization// Accounts of chemical research. 2008, №41(9), p. 1133-1142.

2. Lee, H., Lee, B.P., Messersmith, P.B. A reversible wet/dry adhesive inspired by mussels and geckos // Nature. 2007, №448(7151), p. 338-341.

3. Ma, C., Malessa, A., Boersma, A. J., Liu, K., Herrmann, A. Supercharged proteins and polypeptides // Advanced Materials. 2020, №32(20), 1905309.