**Компьютерное моделирование комплексов пептидов различной топологии с ПАВ**

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

*Аспирант, 2 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 актуальной задачей полимерной науки. Клеи, успешно выполняющие схожие задачи в других областях человеческой деятельности, зачастую не подходят для биомедицинского приложения, поскольку в данном случае необходима не только хорошая когезия и адгезия материала к поверхности, но также - биоразлагаемость и биосовместимость[1]. Подходящим решением задачи могло бы стать выделение противоположно заряженных полипептидов из живых организмов для получения коацерватного комплекса, однако на текущий момент подобный подход оказывается технически сложным для реализации[2]. Перспективной альтернативой является создание комплекса на основе искусственных полипептидов, аминокислотная последовательность которых практически повторяет природные аналоги. В данном направлении особый 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 происходит при добавлении 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.

В данной работе при помощи пакета программ GROMACS проводилось атомистическое моделирование поведения линейных, кольцевых[4], звездообразных полипептидных цепочек и цепей с градиентным распределением заряда, а также их комплексов с молекулами ПАВ в водном растворе. Осуществление силовых экспериментов, заключающихся в вытягивании одного из полипептидов из комплекса, позволило исследовать изменение прочности комплекса в зависимости от длины полипептида и топологии. Таким образом, основным итогом представляемой работы является получение информации о влиянии топологии сверхзаряженных несвернутых полипептидов (СНП) на когезионные свойства комплекса СНП-ПАВ, что вызывает интерес не только с точки зрения фундаментальной науки, но также имеет перспективу использования на практике при создании биосовместимого клея на их основе.

*Авторы выражают благодарность профессору Потемкину И.И. Работа выполнена при поддержке гранта 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.

4. Petrovskii, V.S., Zholudev, S.I., Potemkin, I.I. Linear and ring polypeptides complexed with oppositely charged surfactants: the cohesion of the complexes as revealed in atomistic simulations // Soft Matter. 2024, №20(2), p. 388-396.