**Возможности комбинаторного анализа для изучения структуры ионотропных гелей**

***Казанцева Мария Антоновна 1,*** ***Касперович Александр Викторович 2***

*1студентка 1 курса НИУ «Высшая школа экономики», Московский институт электроники и математики, Москва, Россия,* *E-mail:* [*masha353kazan@gmail.com*](mailto:masha353kazan@gmail.com)

*2студент 2 курса НИУ «Высшая школа экономики», Московский институт электроники и математики, Москва, Россия, E-mail: avkasperovich\_1@edu.hse.ru*

Материалы, приготовленные на основе полисахаридов природного происхождения, включающих в свой состав активные функциональные группы, способные к сорбции тяжелых металлов и различных загрязнителей, являются перспективными материалами для очистки и восстановления окружающей среды. Одним из способов создания подобных материалов на основе анионных полиэлектролитных цепей биополимеров является их сшивание катионами поливалентных металлов. На примере ион-индуцированного образования металл-альгинатных гидрогелей показаны возможности использования методов комбинаторики для изучения структур, возникающих при самосборке биополимерных цепей. Рассмотрено образование плоских зон соединения из альгинатных цепей, состоящих из двух типов структурных звеньев (M и G), присутствующих в неравном количестве и образующих нерегулярные последовательности в каждой биополимерной цепи. Показано, что структура и свойства получаемых гелей в значительной степени зависят не только от вида сшивающих катионов, т.е. от связей, возникающих при комплексообразовании металл/альгинат, но и от возможных вариантов относительного расположения звеньев соседних полимерных цепей, определяемых исходным составом (отношением M/G) используемого альгината. В рамках «egg-box» модели ассоциации биополимерных цепей установлена возможность возникновения не менее семи вариантов различных ячеек, к которым катионы различных двухвалентных металлов имеют свои особые предпочтения, оставляя часть ячеек незанятыми [1,2]. Показано, что, изучение распределения катионов металлов по «egg-box» ячейкам даст возможность оценить возникающее структурообразование и его особенности в каждом конкретном случае, а также предсказать возможные варианты сорбционных явлений [2,3]. Разработанный ранее алгоритм расчета вероятностей появления определенных ячеек для M/G = 3/2 [1] модифицирован и обобщен на случай большого числа взаимодействующих полимерных цепей с произвольным отношением звеньев M/G. С помощью модифицированного алгоритма рассчитаны вероятности образования различных «egg-box» ячеек и найдены их теоретические зависимости от отношения M/G, т.е. от состава исходного альгината, что позволило сравнить теоретические расчеты с экспериментальными данными для альгинатов различного происхождения. На основе литературных данных и выведенных формул, рассмотрены возможности заполнения конкретных биополимерных ячеек двухвалентными катионами. Указано, что приведенный алгоритм расчета вероятностей легко обобщается на случай более сложных структур, состоящих большего числа звеньев. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-64-10020.

**Литература**

1. Makarova A.O., Derkach S.R., Khair T., Kazantseva M.A., Zuev Y.F., Zueva O.S. Ion-Induced Polysaccharide Gelation: Peculiarities of Alginate Egg-Box Association with Different Divalent Cations // Polymers. 2023. Vol. 15. P. 1243.
2. Zueva O.S., Khair T., Kazantseva M.A., Latypova L., Zuev Y.F. Ions-Induced Alginate Gelation According to Elemental Analysis and a Combinatorial Approach // Int. J. Mol. Sci. 2023. Vol. 24. P. 16201.
3. Zueva O.S., Khair T., Derkach S.R., Kazantseva M.A., Zuev, Y.F. Strontium-Induced Gelation of Sodium Alginate in the Presence of Carbon Nanotubes: Elemental Analysis and Gel Structure // J. Compos. Sci. 2023. Vol. 7. P. 0286.