**Тритиевый зонд и компьютерное моделирование в исследовании адсорбции альбумина на оксиде графена**

***Буняев В.А.***

*учебный мастер1, м.н.с.2*

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

*химический факультет, Москва, Россия*

*2ГЕОХИ имени В.И. Вернадского,* *Москва, Россия*

*E–mail:* [*vitalii1992@mail.ru*](mailto:ivanov@yandex.ru)

Модификация поверхности наноуглеродных материалов с помощью биополимеров изменяет физико-химические характеристики как самого углеродного субстрата, так и модифицирующего агента. Полученные комплексы могут обладать интересными для практического применения свойствами. Нетривиальной задачей остается интерпретация межмолекулярных взаимодействий между модификатором и углеродной подложкой. В рамках данной работы проведен комплексный подход в исследовании межмолекулярного взаимодействия между однослойным оксидом графена (ОГ) и белком бычьим сывороточным альбумином (БСА). В данной работе предложено использовать метод тритиевого зонда совместно с компьютерным моделированием для определения состава адсорбционных комплексов БСА с ОГ и характеристики полученных адсорбционных слоев.

БСА различной концентрации с добавкой меченного тритием белка (0,35 Ки/ммоль) инкубировали в водной суспензии ОГ (2,25 ± 0,25 мг/мл) при комнатной температуре в течение трех суток. Количество адсорбированного белка определили по радиоактивности надосадочной жидкости после её отделения от осадка. Для выявления структурных особенностей образующихся адсорбционных слоев белка композит ОГ-БСА обрабатывали атомами трития, полученными на вольфрамовой проволоке, нагретой электрическим током до 1830 К, с последующим анализом распределения трития по аминокислотным остаткам. Также расчет по методу молекулярной динамики осуществили с помощью программы Gromacs. Для анализа выбран файл структуры БСА (PDB: 4F5S) и модель 15 х 15 нм фрагмента ОГ.

Было найдено изменение удельной радиоактивности БСА и распределения трития по типам аминокислотных остатков в комплексах, полученных при разных концентрациях белка в растворе. Установлено, что при количестве адсорбированного БСА выше 279 мг/г наблюдается резкий спад радиоактивности остатков гистидина, что может быть обусловлено снижением доступности поверхности ОГ для атомарного трития. Компьютерное моделирование помогло объяснить полученные результаты. Обнаруженные изменения в радиоактивности белка и распределении трития были интерпретированы с привлечением компьютерного моделирования. Показана важная роль водородных связей между БСА и ОГ в образовании адсорбционного комплекса. Найдено, что в адсорбционном комплексе вторичная структура белка изменяется мало. Выявлен существенный вклад в изменение структуры комплекса межмолекулярных взаимодействий адсорбированных молекул БСА.

*Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.*