

УДК 541.64

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПУРПУРИНА-18 С ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ ГРУППАМИ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПОЛИЛАКТИДА

А.-Т. Т. ТАНДЕЛОВ¹, А. Д. КОРНИЛОВ², Ю. В. ТЕРТЫШНАЯ¹¹Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН²Институт тонких химических технологий имени М. В. Ломоносова (ИТХТ)
РТУ МИРЭА
Москва, Россия

Введение. Исследование направлено на молекулярное моделирование взаимодействий порфиринов с функциональными группами модифицированного полилактида для прогнозирования их конформаций в полимерной матрице [1].

Методика исследования. В Schrodinger Suite 2018-1 смоделированы аморфные ячейки сополимеров PLA/PEG (концентрации 9:1 и 8,5:1,5) методом молекулярной динамики (МД). Размеры ячеек – 28,0793 Å; температура – 320 К; плотность – 0,5 г/см³. Конформерный поиск проведен методами Systematic torsional sampling и Mixed torsional/low-mode sampling с минимизацией методом PRCG [2]. Профили плотности визуализированы и проанализированы с помощью Maestro.

Результаты и обсуждение. В Schrodinger Suite 2018-1 с использованием Polymer Builder смоделированы и уравновешены с помощью молекулярной динамики ячейки PLA/PEG (концентрации 9:1 и 8,5:1,5). Учет двухгранных углов выполнен по распределению Больцмана при 320 К; начальная плотность – 0,5 г/см³; коэффициент ван-дер-ваальсовых взаимодействий – 0,50. МД была реализована через Desmond.

Конформерный поиск методами SPMC и Mixed torsional/low-mode sampling, проведенный в вакууме и воде, не выявил значимых различий.

Программа Hex 8.0.0 использовалась для поиска сайтов связывания порфиринов. Определены три сайта связывания по минимальной энергии, докинг пурпурина-18 выполнен с помощью AutoDock VINA.

Заключение. Проведенное исследование подтвердило возможность точного прогнозирования конформаций и пространственной ориентации в полимерных матрицах. Полученные результаты могут быть использованы для разработки новых материалов на основе порфиринов с улучшенными характеристиками.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Lai, W. C.** The effect of end groups of PEG on the crystallization behaviors of binary crystalline polymer blends PEG/PLLA / W. C. Lai, W. B. Liao, T. T. Lin // Polymer. – 2004. – Vol. 45. – P. 3037–3080.
2. **Glötzer, S. C.** Molecular and mesoscale simulation methods for polymer materials / S. C. Glötzer, W. Paul // Annual Review of Materials Research. – 2002. – Vol. 32. – P. 401–436.