

УДК 541.64:539.2

МОЛЕКУЛЯРНО ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОКОНТЕЙНЕРА НА ОСНОВЕ ДЕНДРИМЕРА, СОДЕРЖАЩЕГО ЛЕЙЦИНОВЫЕ АМИНОКИСЛОТНЫЕ ОСТАТКИ

Жильцова Т.Ю. (федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»)

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Неелов И.М.

(федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»)

Ранее нами были исследованы структурные свойства наноконтейнера K2A на основе лизинового дендримера K с диаланиновыми спейсерами 2A. Целью данной работы является исследование методом молекулярной динамики нового лизинового дендримера K2L с более гидрофобными дилейциновыми спейсерами. Было получено, что форма обоих дендримеров близка к сферической, размеры K2L меньше, чем размеры K2A и, в отличие от K2A, имеют минимум на температурной зависимости в области $T=300-310\text{K}$.

Введение. Использование вирусных векторов для доставки лекарственных препаратов является небезопасным. Поэтому в современной медицине для доставки лекарственных соединений предлагается использовать невирусные векторы. В частности, для этих целей успешно применялись синтетические линейные и разветвленные пептидные молекулы, имеющие сниженную цитотоксичность и способность имитировать свойства натуральных пептидов природного происхождения.

Основная часть. В наших предыдущих работах объектами математического моделирования и экспериментальных исследований структурных и динамических свойств были пептидные дендримеры K2R, K2K и K2H с лизиновыми точками ветвления K и дополнительными положительно заряженными дипептидными спейсерами (2R, 2K или 2H) или лизиновые дендримеры K2G и K2A гидрофобными дипептидными спейсерами (2G и 2A). Для этих дендримеров вначале были исследованы структурные свойства, а потом их способность переносить противоположно заряженные лекарственные молекулы. Основываясь на полученных результатах, мы предполагаем, что замена спейсеров 2G и 2A в пептидном дендримере на лейциновые позволит повысить эффективность переноса этими новыми дендримерами гидрофобных лекарственных молекул. В данной работе мы исследовали структурные характеристики пептидного дендримера K2L с двойными лейциновыми вставками (2L) и сравнили их с характеристиками недавно исследованного нами пептидного дендримера K2A с менее гидрофобными аланиновыми спейсерами (2A).

Выводы. Показано, что временные зависимости размеров нового дендримера K2L, как и в случае K2A, флуктуируют, однако как средние размеры, так и амплитуда флуктуаций размеров не меняются со временем, а оба дендримера имеют форму близкую к сферической. В то же время, и размеры, и величина их флуктуации для K2L оказались существенно меньшими, чем для K2A. Температурная зависимость размеров дендримера K2L имеет характерный минимум размеров в области температур 300K-310K. Плотность атомов дендримера K2L вблизи его центра выше, чем для менее гидрофобного дендримера K2A. Было также показано, что температура слабо влияет на общую радиальную плотность дендримера K2L. В то же время ширина радиального распределения концов дендримера заметно увеличивается с температурой.