

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА САМООРГАНИЗАЦИИ «БЕЛКОВОПОДОБНЫХ» НР-СОПОЛИМЕРОВ С РАЗЛИЧНЫМ ПРОЦЕНТНЫМ СОСТАВОМ ЗВЕНЬЕВ

Михайлюк М.Г., Терёшкина К.Б., Федик И.В.<sup>1</sup>, Шайтан К.В.<sup>1</sup>, Крупянский Ю.Ф.

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Россия, 119991 Москва, ул.  
Косыгина, 4. +7(495)9397300, yufk@chph.ras.ru

<sup>1</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Россия, 119992  
Москва, Воробьевы горы, 1-12

Создание функциональных полимеров на основе биомиметического подхода – актуальная задача в области наук о материалах и нанотехнологии. В основополагающих работах [1, 2] предложена схема создания специальных первичных «белковоподобных» структур НР сополимеров. Там же рассмотрена модель молекулярной эволюции белковоподобных сополимеров. Показано, что могут реализовываться как восходящая, так и нисходящая ветви эволюции, в зависимости от величины параметра взаимодействия РР единиц. В этих работах соотношение мономеров Н и Р, для простоты, бралось равным 1:1.

В настоящей работе методом молекулярной динамики рассмотрена самоорганизация НР сополимеров, при различном соотношении Н и Р единиц. Разбиение мономеров на гидрофильные, или полярные (Р) и гидрофобные (Н) единицы проводилось так же как и в работах [1, 2]. Число мономерных звеньев бралось равным 256. Соотношение Н и Р единиц варьировалось в широком интервале от 1:1 до 1:50. Величина взаимодействия между НН субъединицами (при температуре  $T = 300$  К) была выбрана равной  $2kT$  и далее не варьировалась. Было показано, что практически при всех соотношениях Н и Р единиц радиус гирации сильно уменьшался при увеличении  $\epsilon$  до  $0,4 kT$  и далее с ростом  $\epsilon$  плавно и незначительно убывал. Анализ данных свидетельствует о том, что восходящая ветвь эволюции реализуется выше определённого  $\epsilon$  лишь при соотношении Н и Р единиц, превышающем некоторое критическое значение.

Таким образом, чтобы наблюдалось эффективное обучение (или восходящая ветвь эволюции) необходимо выполнение двух условий в ряду генерируемых поколений: высокая скорость сворачивания (критерий скорости обучения) и оптимальное соотношение между мономерами ( $H:P \geq 1:10$ ).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 09-04-01081а) и гранта Отделения химии и наук о материалах (Программа 3/ОХ – 09).

### Литература

1. *Khokhlov A.R., Khalatur P.G.* Conformation-Dependent Sequence Design (Engineering) of AB Copolymers // *Phys.Rev.Lett.*, **82**, 1999, p. 3456
2. *Khalatur P.G., Novikov V.V., Khokhlov A.R.* Conformation-Dependent Evolution of Copolymer Sequences // *Phys. Rev. E*, **67**, 2004, 051901