**Безродный, Валерий Валерьевич.**

## Молекулярно-динамическое моделирование линейных и разветвлённых пептидных полиэлектролитов : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.06 / Безродный Валерий Валерьевич ; [Место защиты: ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет ИТМО»]. - Санкт-Петербург, 2021. - 331 с. : ил.; 14,5х20,5 см.

## Оглавление диссертациикандидат наук Безродный Валерий Валерьевич

Реферат

Synopsis

Введение

Глава 1. Метод молекулярной динамики для исследования пептидов и пептидных дендримеров

1.1 Метод молекулярной динамики

1.2 Моделирование в пакете GROMACS

Глава 2. Исследование линейных лизиновых пептидов различной топологии

2.1. Введение

2.2 Размеры пептидов

2.3 Внутренняя структура пептидов

2.4 Подвижность и времена корреляции пептидов

2.5 Выводы к главе

Глава 3. Исследование поверхностно и объемно заряженных лизинсодержащих дендримеров с линейными дипептидными спейсепами

3.1. Влияние объема и заряда дипептидных спейсеров на структуру и подвижность пептидных дендримеров

3.1.1 Размеры дендримеров

3.1.2 Внутренняя структура

3.2. Влияние положения ЯМР активных групп дипептидных спейсеров на их подвижность

3.2.1 Размеры дендримеров

3.2.2 Внутренняя структура дендримеров

3.2.3 Подвижность и времена корреляции дендримеров

3.3. Влияние pH на структуру и подвижность дендримеров с дипептидными спейсерами

3.3.1 Размеры дендримеров

3.3.2 Внутренняя структура дендримеров

3.3.3 Подвижность и времена корреляции дендримеров

3.4 Выводы к главе

Глава 4. Взаимодействие новых пептидных дендримеров с молекулами лекарственного олигопептида ЛЕВО

4.1. Взаимодействие дендримера Lys2Arg с олигопептидами AEDG

4.1.1 Материалы и методы

4.1.2 Образование комплекса

4.1.3 Радиус инерции системы

4.1.4 Расстояние между дендримером и пептидами

4.1.5 Общее число водородных связей между дендримерами

4.1.6 Свойства комплекса

4.1.7 Выводы

4.2. Взаимодействия дендримера Lys2His/Lys2Hisp с молекулами лекарственного олигопептида AEDG при разных pH

4.2.1 Материалы и методы

4.2.2 Образование комплекса

4.2.3 Равновесные характеристики

4.2.4 Выводы

Заключение

Список литературы

Приложение А - тексты публикаций