

УДК 541.64:539.2

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕПТИДНЫХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ

И.М. Неелов^{a, b}, А.А. Мистонова^a, А.Ю. Хватов^a, В.В. Безродный^a

^a Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия;

^b Университет г. Хельсинки, Хельсинки, Финляндия, i.neelov@mail.ru

Аннотация. Методы компьютерного моделирования применены для исследования конформационных свойств некоторых заряженных гомополипептидов в разбавленных водных растворах. С помощью метода молекулярной динамики изучены полноатомные модели полилизина и полиаспарагиновой кислоты с явным учетом воды и противоионов. Рассчитаны размеры, форма, функции распределения, временные корреляционные функции радиуса инерции и расстояний между концами пептидных цепей. Получены характеристики сольватации рассмотренных полиэлектролитов. Установлено, что полиаспарагиновая кислота имеет в разбавленном водном растворе более компактную структуру и более сферическую форму, чем полилизин. Показано, что это связано с различным взаимодействием между рассмотренными полипептидами и молекулами воды (в частности, количеством и качеством водородных связей, образованных этими пептидами с водой), а также с различием в количестве ионных пар, образуемых заряженными группами пептидов и противоионами. Полученные результаты необходимо учитывать при создании различных изделий на основе исследованных пептидов и их применении в различных промышленных и биомедицинских приложениях.

Ключевые слова: полиэлектролиты, пептиды, компьютерное моделирование, метод молекулярной динамики.

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF PEPTIDE POLYELECTROLYTES

I.M. Neelov^{a, b}, A.A. Mistonova^a, A.Yu. Khvatov^a, V.V. Bezrodny^a

^a ITMO University, Saint Petersburg, Russia;

^b University of Helsinki, Helsinki, Finland, i.neelov@mail.ru

Abstract. The paper deals with investigation of the conformational properties of some charged homopolypeptides in dilute aqueous solutions by computer simulation. A method of molecular dynamics for the full-atomic models of polyaspartic acid and polylysine with explicit account of water and counter-ions is used for this purpose. For systems containing these polypeptides we calculated time trajectories and the size, shape, distribution functions and time correlation functions of inertia radius and the distances between the ends of peptide chains. We have also calculated the solvation characteristics of considered polyelectrolytes. We have found out that polyaspartic acid in dilute aqueous solution has more compact structure and more spherical shape than polylysine. We have shown that these differences are due to different interaction between the polypeptides and water molecules (in particular, the quality and quantity of hydrogen bonds formed by these peptides with water), and the difference in an amount of ion pairs formed by the charged groups of the peptides and counter-ions. The obtained results should be taken into account for elaboration of new products based on the investigated peptides and their usage in various industrial and biomedical applications.

Keywords: polyelectrolytes, peptides, computer simulation, molecular dynamics method.

Введение

Полиэлектролиты (ПЭ) – это полимеры с ионизируемыми группами, которые диссоциируют в водном растворе [1]. ПЭ широко используются во многих приложениях как суперабсорбенты, стабилизаторы и флокулянты, структурообразователи и загустители, а также для получения полимер-полимерных комплексов [2]. Одними из наиболее широко используемых синтетических ПЭ являются полиакриловая и полиметакриловая кислоты [3, 4]. В последние годы одной из важнейших задач является переход к использованию экологически чистых биосовместимых и биоразлагаемых полимеров и, в частности, биоразлагаемых ПЭ. Для этой цели могут быть использованы как природные, так и синтетические макромолекулы, а также их смеси и сополимеры. Одним из возможных вариантов является использование пептидных ПЭ и, в частности, заряженных гомополипептидов. Например, такой гомополипептид, как полилизин, широко используется в медицине в качестве подложки для выращивания клеточных культур, для доставки противораковых препаратов, в качестве невирусных векторов для доставки ДНК в клетки и других целей. Полиаспарагиновая кислота также широко используется во многих биомедицинских приложениях, например, при создании новых лекарственных препаратов и средств доставки для них [5], при создании трансплантатов, а также для опреснения морской воды [6].

Теоретические исследования и моделирование полиэлектролитных систем обычно проводятся на основе крупномасштабных (coarse-grained) моделей, которые хорошо описывают глобальные свойства этих систем. В то же время применимость этих моделей для реальных ПЭ на масштабах порядка размеров молекулы не вполне очевидна. В настоящее время в литературе имеется небольшое количество работ, посвященных моделированию ПЭ на основе детальных молекулярных моделей. В начале 2000-х г.г. была опубликована серия работ по ПЭ на основе полиэтиленоксида (ПЭО) для топливных ячеек [7–10]. В этих работах методом МД на полноатомных моделях исследовались структура ПЭО в водном растворе и коэффициенты диффузии различных ионов в этой системе. В последние годы появились работы, посвященные моделированию методом молекулярной динамики (МД) полиакриловой и полиметакриловой кислот (ПАК и ПМАК соответственно) [11] и полиаспарагиновой кислоты [12] на полноатомных моде-

лях. В первой из них [11] проведено сопоставление радиусов инерции ПАК и ПМАК и взаимодействия заряженных COO^- групп с молекулами воды при разных степенях ионизации (соотношениях COO^- и COOH групп) рассматриваемых ПЭ. Во второй работе [12] проведено сопоставление свойств полиаспарагиновой кислоты с незаряженными (COOH) и заряженными (COO^-) боковыми группами и показано, что в первом случае основная цепь имеет конформацию клубка, а в последнем – более вытянутую конформацию из-за сильных электростатических взаимодействий между заряженными COO^- группами.

В настоящей работе проведено моделирование на полноатомных моделях двух противоположно заряженных гомополипептидов (полилизина и полиаспарагиновой кислоты) в разбавленных водных растворах. Для этих молекул получены основные структурные характеристики (размеры, форма, расстояния между концами, функции распределения расстояний между концами пептидной цепи и временные корреляционные функции для этих расстояний), а также исследованы закономерности сольватации и образования водородных связей и ионных пар в рассмотренных системах.

Модель и метод расчета

Моделирование проводили методом молекулярной динамики для обеих систем, включающих в себя один гомополипептид (полилизин или полиаспарагиновую кислоту, состоящие из 32-х аминокислотных остатков каждый), молекулы воды и 32 противоиона (хлора для полилизина или натрия для полиаспарагиновой кислоты). Системы помещали в кубическую ячейку размером 9 нм с периодическими граничными условиями. Начальные конформации для обоих пептидов с одинаковыми углами внутреннего вращения в каждом аминокислотном остатке ($\varphi = -135^\circ$, $\psi = 135^\circ$, $\theta = 180^\circ$) задавали с помощью программного пакета HyperChem [13], и они соответствовали вытянутой конформации основной цепи в β -листе (β -sheet). Полученные структуры оптимизировали вначале в вакууме методом молекулярной механики на полноатомной модели с силовым полем Amber. Дальнейшую минимизацию энергии и моделирование проводили с использованием пакета GROMACS 4.5.5 [14] и одного из наиболее современных силовых полей AMBER_99SB_ildn [15]. Потенциальная энергия в этом силовом поле состоит из энергий деформации валентных связей и углов, углов внутреннего вращения, ван-дер-ваальсовых и электростатических взаимодействий. Каждый МД расчет длительностью 150 нс включал в себя уравнивание системы в течение 50 нс и основной расчет длительностью 100 нс при температуре 300 К, во время которого рассчитывались средние величины, функции распределения и временные корреляционные функции. Более детальное описание параметров моделирования приводится в наших предыдущих работах по моделированию систем на основе лизиновых мономеров [16–19].

Результаты и их обсуждение

Конформации молекул полилизина с противоионами хлора и полиаспарагиновой кислоты с противоионами натрия в конце молекулярно-динамического моделирования длительностью 150 нс приведены на рис. 1. Обе макромолекулы имеют довольно вытянутую конформацию, хотя молекула полилизина (рис. 1, а) выглядит более вытянутой, чем полиаспарагиновая кислота (рис. 1, б). При этом видно, что контрионы хлора (рис. 1, а) находятся в основном в растворе, в то время как большинство противоионов натрия находятся непосредственно на поверхности полиаспарагиновой кислоты (рис. 1, б).

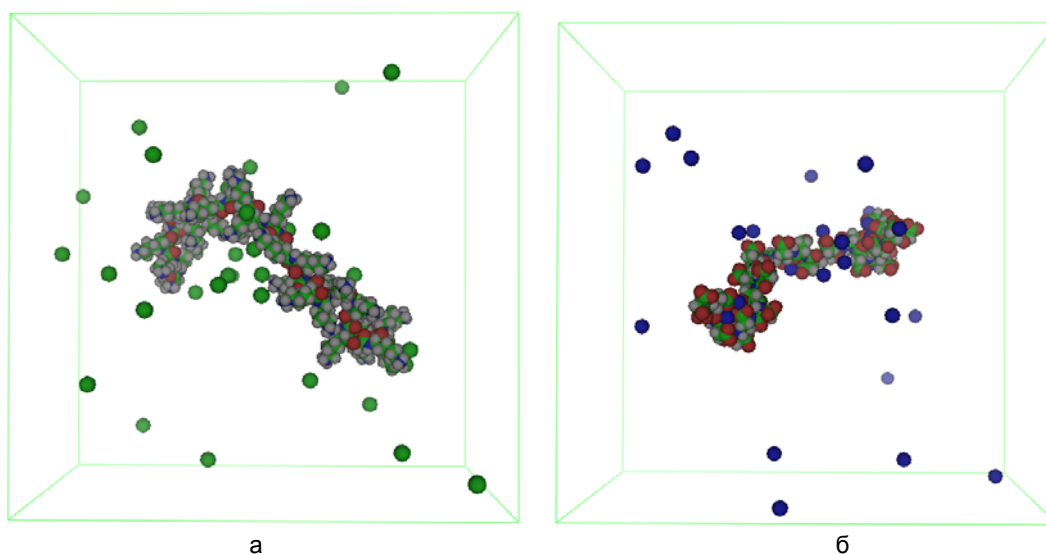


Рис. 1. Конформации полилизина (с противоионами хлора) (а) и полиаспарагиновой кислоты (с противоионами натрия) (б) в конце моделирования методом МД в течение 150 нс (молекулы воды не показаны для ясности). Длина ребра периодической кубической ячейки в обоих случаях равна 9 нм

Для характеристики конформационного состояния, размеров и формы полипептидов в таблице приводятся усредненные по всей рассчитанной траектории величины: радиусы инерции цепей и собственные значения тензора инерции этих цепей, а также расстояния между концами пептидных цепей.

	R_g , нм	R_g^{11} , нм	R_g^{22} , нм	R_g^{33} , нм	R , нм
<i>Lys</i> ₃₂	0,225	0,077	0,214	0,223	0,491
<i>Asp</i> ₃₂	0,180	0,071	0,169	0,177	0,421

Таблица. Среднеквадратичные значения радиуса инерции цепи R_g , трех собственных значений тензора инерции цепи R_g^{11} , R_g^{22} , R_g^{33} и расстояния между концами основной цепи R для полилизина (*Lys*₃₂) и полиаспарагиновой кислоты (*Asp*₃₂) со степенью полимеризации $N=32$

Полилизин имеет более длинные линейные боковые группы и на 10% бóльшую молекулярную массу мономерного звена, чем полиаспарагиновая кислота, поэтому естественно предположить, что радиус инерции полилизина будет больше, чем у полиаспарагиновой кислоты с той же степенью полимеризации N (в нашем случае $N=32$). Действительно, усредненный по траектории среднеквадратичный радиус инерции исследованного полилизина равен 0,225 нм, в то время как радиус инерции полиаспарагиновой кислоты – только 0,180 нм. Форма обеих молекул может быть охарактеризована соотношением главных компонент их тензора инерции. Наибольшая компонента тензора инерции R_g^{33} полилизина на 26% больше, чем у полиаспарагиновой кислоты. В то же время наименьшая компонента полилизина только на 10% больше, и, следовательно, анизотропия, которая может характеризоваться отношением R_g^{33} / R_g^{11} , также больше у полилизина (2,90 по сравнению с 2,49 у полиаспарагиновой кислоты). Среднеквадратичное расстояние между концами основной цепи (таблица) также оказывается бóльшим у полилизина: 0,491 нм по сравнению с 0,421 нм у полиаспарагиновой кислоты, т.е. примерно на 17%. Таким образом, полилизин имеет на 25% бóльший радиус инерции, на 16% бóльшую анизотропию и на 17% бóльшее расстояние между концами основной цепи по сравнению с полиаспарагиновой кислотой. Это отличие может быть связано не только с несколько бóльшей молекулярной массой мономера полилизина, но и с уже отмеченным фактом, что у полилизина в рассмотренной системе противоионы не так тесно связаны с его заряженными боковыми группами (рис. 1). В литературе существует ограниченное количество экспериментальных данных по размерам линейных полипептидов, поэтому сравнить полученные результаты с ними не представляется возможным. В то же время для полиаспарагиновой кислоты имеется информация о том, что она может принимать конформацию статистического клубка при физиологических условиях [20].

Более детальную информацию о конформации линейных полимерных цепей вообще и ПЭ, в частности, дают функции распределения по размерам (по радиусам инерции R_g) и по расстояниям между концами основной цепи R . Эти функции приведены на рис. 2. Функции распределения для радиусов инерции (рис. 2, а) показывают, что максимальные значения R_g для этих цепей (около 2,6 нм) встречаются одинаково часто, в то время как пик функции распределения и минимальное значение R_g для полиаспарагиновой кислоты (кривая 2) сдвинуты в область меньших значений R_g по сравнению с соответствующими характеристиками (кривая 1) для полилизина. Это согласуется с более компактной конформацией полиаспарагиновой кислоты и бóльшим количеством противоионов, находящихся вблизи заряженных групп этого ПЭ (рис. 1, б). Функция распределения по расстояниям между концами основной цепи $p(R)$, приведенная на (рис. 2, б) для полиаспарагиновой кислоты (кривая 2), также смещена в область малых R по сравнению с $p(R)$ для полилизина (кривая 1), однако эта $p(R)$, в отличие от $p(R_g)$, смещена для полиаспарагиновой кислоты в область меньших R во всем интервале изменения $p(R)$.

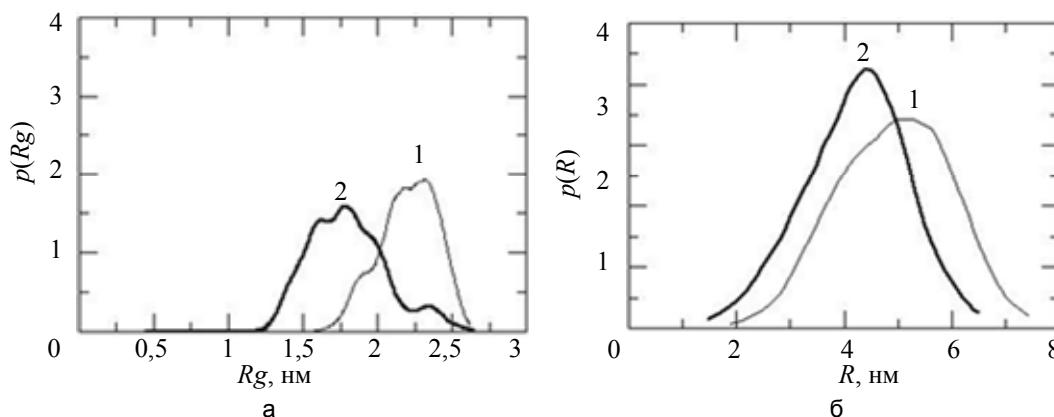


Рис. 2. Функции распределения: для радиуса инерции полипептида $p(R_g)$ (а) и для расстояния между концами основной цепи пептида $p(R)$ (б) (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Характерное время флуктуаций размеров R_g и расстояний между концами линейной полимерной цепи R может быть получено из наклона зависимости временной автокорреляционной функции $C(t) = (\langle X(t')X(t'+t) \rangle - \langle X \rangle^2) / (\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2)$ для величин $X=R_g$ (радиус инерции) и $X=R$ (расстояние между концами цепи), где t – время, в течение которого рассчитывается корреляционная функция, а $\langle \rangle$ означает усреднение по всем временам t' вдоль МД траектории. Временные зависимости $C(t)$ для $X=R_g$ (на рис. 3, а) и $X=R$ (на рис. 3, б) говорят о том, что флуктуации размеров полилизина происходят быстрее, чем флуктуации размеров полиаспарагиновой кислоты, а флуктуации расстояний между концами цепей происходят примерно с одинаковой скоростью. В случае простейшего описания релаксации функции $C(t)$ одной экспонентой характерные времена релаксации для R_g близки к 1 нс и 3 нс для полилизина и полиаспарагиновой кислоты соответственно, а для расстояния между концами R релаксация для обоих ПЭ происходит с примерно одинаковым временем (порядка 1 нс), которое, в свою очередь, близко к времени релаксации R_g для полилизина.

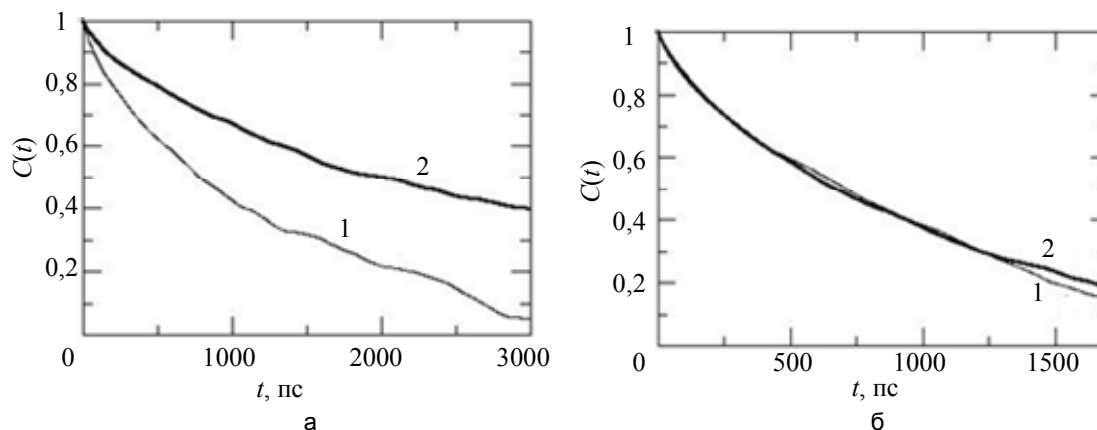


Рис. 3. Временная автокорреляционная функция $C(t)$ для радиуса инерции цепи R_g (а) и для расстояния между концами цепи R (б) (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Взаимодействия заряженных групп полилизина и полиаспарагиновой кислоты при их растворении в воде могут быть описаны радиальной функцией распределения $g(r)$ между этими заряженными группами (NH_3^+ в полилизине и COO^- в полиаспарагиновой кислоте) и молекулами воды. Зависимости $g(r)$ для полилизина (кривая 1) и полиаспарагиновой кислоты (кривая 2) приведены на рис. 4, а. Хорошо видно, что минимальное расстояние, на которое вода приближается к зарядам, составляет менее 0,15 нм для полиаспарагиновой кислоты (кривая 2) и более 0,25 нм для полилизина (кривая 1). Аналогичный результат был получен для радиальных функций распределения $g(r)$ между заряженными группами ПЭ и противоионами, приведенными на рис. 4, б. Хорошо видно, что противоионы натрия приближаются к зарядам полиаспарагиновой кислоты на расстояние порядка 0,2 нм, в то время как противоионы хлора могут приближаться к зарядам полилизина только примерно до 0,3 нм. Кроме того пиковое значение функции $g(r)$ для полиаспарагиновой кислоты (кривая 2) примерно на порядок больше, чем для полилизина (кривая 1). Таким образом, полиаспарагиновая кислота образует существенно большее количество ионных пар с противоионами, чем полилизин. Эти данные находятся в соответствии с более близким положением противоионов натрия на поверхности полиаспарагиновой кислоты на рис. 1, б, по сравнению с более удаленным расположением противоионов хлора по отношению к поверхности полилизина на рис. 1, а.

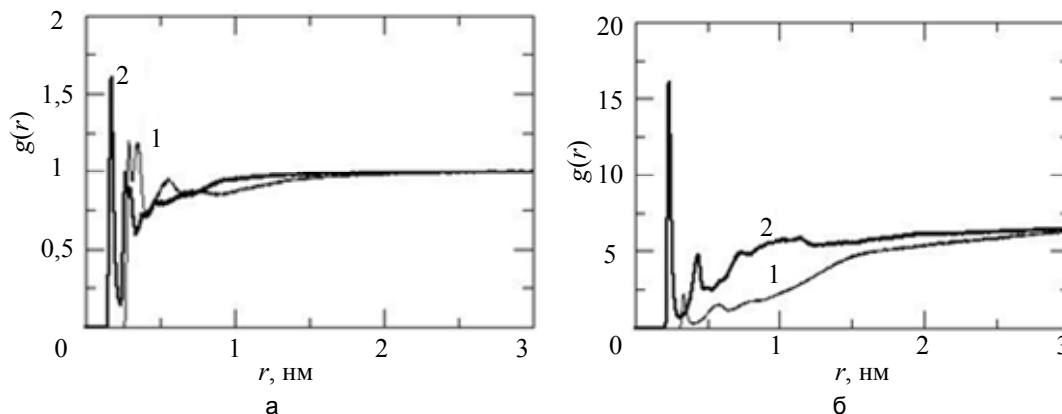


Рис. 4. Радиальная функция распределения $g(r)$ между заряженными группами основной цепи и молекулами воды (нормированная $g(r)$) (а) и противоионами (ненормированная $g(r)$) (б) (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Водородные связи играют важную роль в биомолекулярных системах вообще и в белках, в частности. Например, в зависимости от внешних условий они могут стабилизировать вторичную структуру как спиральной, так и складчатой конформаций пептидов и белков. В связи с этим важной характеристикой взаимодействия растворенных в воде пептидов является среднее число внутри- и межмолекулярных водородных связей в системе, в частности, число водородных связей, образованных пептидами с водой, а также функции распределения по числу и по длинам этих связей, приведенные на рис. 5, а, и рис. 5, б, соответственно. Полученное нами среднее число водородных связей, образованных молекулой полиаспарагиновой кислоты с водой (порядка 210), оказывается бóльшим, чем среднее число водородных связей, образованных полилизинном (около 145). Функции распределения по числу водородных связей довольно симметричны и имеют пиковые значения при числах связей, близких к средним значениям. Функции распределения по длинам водородных связей (рис. 5, б) дают средние (и близкие к ним пиковые) значения длин водородных связей d для полиаспарагиновой кислоты ($d=0,27$ нм), меньшие по сравнению с длинами этих связей для полилизина ($d=0,29$ нм). Таким образом, и эти функции подтверждают более близкие контактные расстояния полиаспарагиновой кислоты с молекулами воды по сравнению с полилизинном.

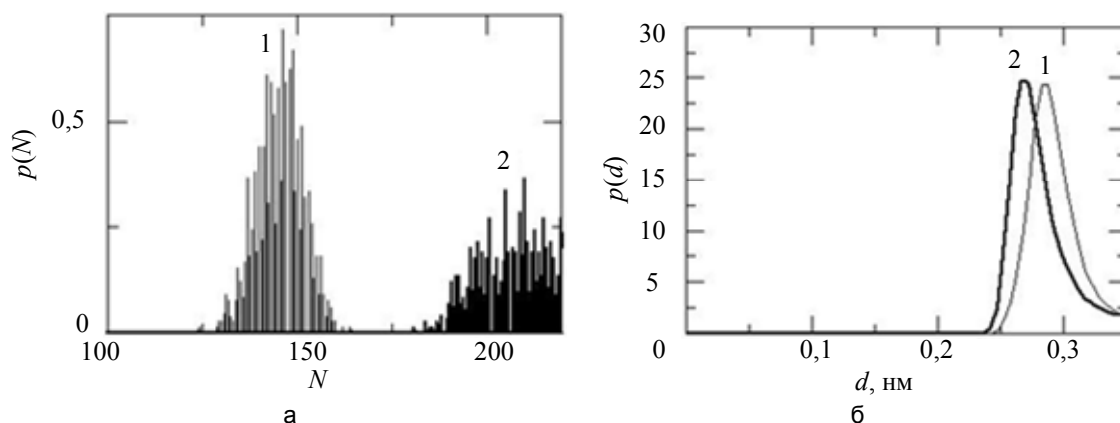


Рис. 5. Функция распределения по числу (а), и по длинам водородных связей (б) между полиэлектролитом и водой (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Водородные связи, кроме расстояния, характеризуются еще и направлением (углом). На рис. 6 построены распределения по углам водородных связей с водой для обоих ПЭ. Максимум распределения по углам для водородных связей полиаспарагиновой кислоты с водой находится в области меньших углов с максимумом при значениях угла около 8° , в то время как соответствующее распределение для полилизина смещено в сторону больших углов и имеет плато в области $10\text{--}17^\circ$. Меньшие значения углов (как и меньшие расстояния) соответствуют более прочным водородным связям. Таким образом, и по этому параметру водородные связи полиаспарагиновой кислоты с водой являются более устойчивыми, чем у полилизина.

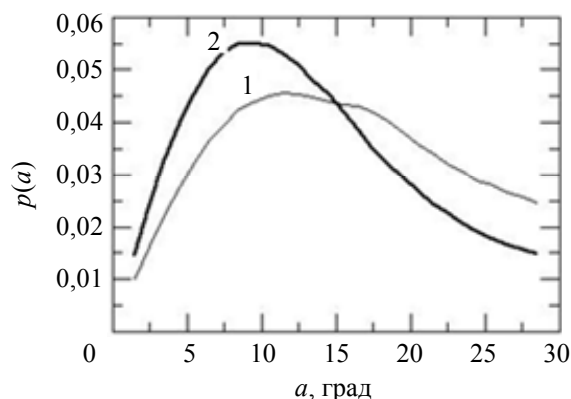


Рис. 6. Функция распределения по углам водородных связей между полиэлектролитом и водой (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Заключение

В работе с помощью компьютерного моделирования методом молекулярной динамики на полно-атомных моделях исследованы конформационные свойства молекул двух противоположно заряженных гомополипептидов – полилизина и полиаспарагиновой кислоты – в разбавленных водных растворах. Для этих молекул получены размеры, форма, функции распределения и временные корреляционные функции радиуса инерции и расстояний между концами пептидной цепи, а также исследованы характеристики

сольватации рассмотренных полиэлектролитов в воде с образованием водородных связей и ионных пар. Показано, что полиаспарагиновая кислота имеет более компактную и менее анизотропную конформацию по сравнению с полилизинном той же степени полимеризации. Расчет характеристик, описывающих сольватацию этих полипептидов, показал, что полиаспарагиновая кислота имеет больше контактов с водой и с противоионами, растворенными в воде. Последнее отличие приводит к большему экранированию отталкивающих электростатических взаимодействий между заряженными группами внутри цепи и уменьшению ее размеров и анизотропии по сравнению с полилизинном. В следующих работах планируется исследовать структуру комплексов и блоксополимеров, включающих эти пептиды, и сравнить их характеристики в составе различных структур с характеристиками отдельных пептидов, полученными в данной работе.

References

1. Oosawa F. *Polyelectrolytes*. New York, Marcel Dekker, 1971, 160 p.
2. Dobrynin A.V. Solutions of charged polymers. *Polymer Science: A Comprehensive Reference*, 2012, vol. 1, pp. 81–132. doi: 10.1016/B978-0-444-53349-4.00005-4
3. Soloviev V.S., Uspenskaya M.V., Sirotinkin N.V. Polimernye vodopogloshchayushchie kompozitsii s povyshennoi prochnost'yu [Polymer water-absorbing high-strength composites]. *Izv. vuzov. Priborostroenie*, 2010, vol. 53, no. 4, pp. 63–65.
4. Zatsepin I.Yu., Soloviev V.S. Sorbtitsiya ionov metallov polimernymi kompozitami [Ions sorption metal polymer composites]. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2008, no. 4 (49), pp. 235–237.
5. Rivera-Rodriguez G.R., Alonso M.J., Torres D. Poly-L-asparagine nanocapsules as anticancer drug delivery vehicles. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 2013, vol. 85, no. 3 part A, pp. 481–487. doi: 10.1016/j.ejpb.2013.08.001
6. Chekli L., Phuntsho S., Shon H.K., Vigneswaran S., Kandasamy J., Chanan A. A review of draw solutes in forward osmosis process and their use in modern applications. *Desalination and Water Treatment*, 2012, vol. 43, no. 1-3, pp. 167–184. doi: 10.1080/19443994.2012.672168
7. Ennari J., Neelov I., Sundholm F. Estimation of the ion conductivity of a PEO-based polyelectrolyte system by molecular modeling. *Polymer*, 2001, vol. 42, no. 19, pp. 8043–8050. doi: 10.1016/S0032-3861(01)00311-1
8. Ennari J., Neelov I., Sundholm F. Molecular dynamics simulation of the structure of PEO based solid polymer electrolytes. *Polymer*, 2000, vol. 41, no. 11, pp. 4057–4063. doi: 10.1016/S0032-3861(99)00642-4
9. Ennari J., Elomaa M., Neelov I., Sundholm F. Modeling of water-free and water containing solid polyelectrolytes. *Polymer*, 2000, vol. 41, no. 3, pp. 985–990. doi: 10.1016/S0032-3861(99)00235-9
10. Ennari J., Neelov I., Sundholm F. Molecular dynamics simulation of the PEO sulfonic acid anion in water. *Computational and Theoretical Polymer Science*, 2000, vol. 10, no. 5, pp. 403–410. doi: 10.1016/S1089-3156(00)00006-4
11. Sulatha M.S., Natarajan U. Origin of the difference in structural behavior of poly(acrylic acid) and poly(methacrylic acid) in aqueous solution discerned by explicit-solvent explicit-ion MD simulations. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2011, vol. 50, no. 21, pp. 11785–11796. doi: 10.1021/ie2014845
12. Ramachandran S., Katha A.R., Kolake S.M., Jung B., Han S. Dynamics of dilute solutions of poly (aspartic acid) and its sodium salt elucidated from atomistic molecular dynamics simulations with explicit water. *Journal of Physical Chemistry B*, 2013, vol. 117, no. 44, pp. 13906–13913. doi: 10.1021/jp406760v
13. *Chemistry Software, HyperChem, Molecular Modeling*. Available at: <http://www.hyper.com> (accessed 20.06.14).
14. Hess B., Kutzner C., Spoel D., Lindahl E. GRGMACS 4: Algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2008, vol. 4, no. 3, pp. 435–447. doi: 10.1021/ct700301q
15. Hornak V., Abel R., Okur A., Strockbine D., Roitberg A., Simmerling C. Comparison of multiple amber force fields and development of improved protein backbone parameters. *Proteins: Structure Function and Genetics*, 2006, vol. 65, no. 3, pp. 712–225. doi: 10.1002/prot.21123
16. Neelov I.M., Markelov D.A., Falkovich S.G., Ilyash M.Yu., Okrugin B.M., Darinskii A.A. Mathematical simulation of lysine dendrimers: Temperature dependences. *Polymer Science - Series C*, 2013, vol. 55, no. 1, pp. 154–161. doi: 10.1134/S1811238213050032
17. Falkovich S., Markelov D., Neelov I., Darinskii A. Are structural properties of dendrimers sensitive to the symmetry of branching? Computer simulation of lysine dendrimers. *Journal of Chemical Physics*, 2013, vol. 139, no.6, art. no. 064903. doi: 10.1063/1.4817337
18. Neelov I., Falkovich S., Markelov D., Paci E., Darinskii A., Tenhu H. Molecular Dynamics of Lysine Dendrimers. Computer Simulation and NMR. In: *Dendrimers in Biomedical Applications*. London, Royal Society of Chemistry, 2013, pp. 99–114. doi: 10.1039/9781849737296-00099
19. Neelov I.M., Janaszewska A., Klajnert B., Bryszewska M., Makova N., Hicks D., Pearson H., Vlasov G.P., Ilyash M.Yu., Vasilev D.S., Dubrovskaya N.M., Tumanova N.L., Zhuravin I.A., Turner A.J., Nalivaeva N.N. Molecular properties of lysine dendrimers and their interactions with $\alpha\beta$ -peptides and neuronal cells. *Current Medical Chemistry*, 2013, vol. 20, no. 1, pp. 134–143. doi: 10.2174/09298673130113
20. Horkay F., Hecht A.-M., Geissler E. Similarities between polyelectrolyte gels and biopolymer solutions. *Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics*, 2006, vol. 44, no. 24, pp. 3679–3686. doi: 10.1002/polb.21008

- Неелов Игорь Михайлович** – доктор физико-математических наук, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; профессор, Университет г. Хельсинки, Хельсинки, Финляндия, i.neelov@mail.ru
- Мистонова Анастасия Андреевна** – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, misstons@gmail.ru
- Хватов Анатолий Юрьевич** – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, khvatovtolik@gmail.com
- Безродный Валерий Валерьевич** – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, Wolya13@rambler.ru
- Igor M. Neelov** – D.Sc., Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia; Professor, University of Helsinki, Helsinki, Finland, i.neelov@mail.ru
- Anastasiya A. Mistonova** – student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, misstons@gmail.ru
- Anatoliy Yu. Khvatov** – student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, khvatovtolik@gmail.com
- Valeriy V. Bezrodny** – student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, Wolya13@rambler.ru

*Принято к печати 02.06.14
Accepted 02.06.14*