



Kuriame  
Lietuvos ateitį  
2014–2020 metų  
Europos Sąjungos  
fondų investicijų  
veiksmy programa

**Finansuojama Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonės Nr. 09.3.3-LMT-K-712 veiklą „Mokslininkų kvalifikacijos tobulinimas vykdant aukšto lygio MTEP projektus“.**

**Antimikrobinių titano oksido plonų sluoksnių paviršių savybių prognozavimo modelio kūrimas, Nr. 09.3.3-LMT-K-712-01-0162, 2018-2021, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, prof. dr. Žilvinas Rinkevičius, prof. dr. Giedrius Laukaitis**

Nepaisant daugelio esamų stiprių antibiotikų ir kitų antimikrobinių priemonių, bakterinės infekcijos vis dar yra pagrindinė sergamumo, implantų atmetimo ir mirtingumo priežastis. Poreikis kurti papildomas baktericidines priemones gerokai išauga dėl daugelio bakterijų padermių ir su bakteriologinėmis bioplėvelėmis susijusių infekcijų atsparumo vaistiniams preparatams. Pagrindiniai veiksniai, sąlygojantys bakterijų sukibimą su kietuoju paviršiumi ir bioplėvelių formavimąsi, yra fizinės ir cheminės bakterinės ląstelės paviršiaus savybės. Bakterijų ląstelių apvalkalų sudėtingumas iki šiol neleidžia sukurti bakterijos-bioplėvelės sistemų daugiasluoksnių modelių, ir tik neseniai buvo padaryta pažanga Gram-neigiamų bakterijų ląstelių apvalkalų molekulinės dinamikos modeliavime naudojant stambiagrūdės sistemos (coarse-grained, CG) modelį. Kompleksiškai įvertinančių bakterijų ląstelės apvalkalo sąveikos su skirtingais keramikos paviršiais modelių iki šiol nėra sukurta. Šiame projekte pasinaudosime minėtais pasiekimais ir išplėsime dabartinį ląstelės apvalkalo aprašantį CG artinio modelį, kad galėtume aprašyti sąveiką tarp ląstelės apvalkalų ir titano oksido ( $\text{TiO}_2$ ) paviršių su įterptomis metalinėmis nanodalelėmis arba be jų. Sukurtas molekulinės dinamikos modelis leis modeliuoti sąveiką tarp Gram-neigiamų bakterijų ląstelės apvalkalo ir  $\text{TiO}_2$  paviršių. Gauti rezultatai bus naudojami ne tik tam, kad gauti mikroskopinį supratimą apie atominius veiksnius, reguliuojančius sąveiką tarp ląstelės apvalkalo ir  $\text{TiO}_2$  paviršių, bet ir apibrėš sąlygas suformuoti reikiamų parametrų antimikrobines dangas naudojant vakuuminio nusodinimo metodus. Šio projekto tikslas – sukurti suformuotų antimikrobinių struktūrų savybių prognozavimo modelį įvairioms Gram-neigiamoms bakterijoms panaudojant save mokačias sistemas. Modelio sukūrimas sąlygotų naujų antimikrobinių dangų panaudojimą bei bakterijų kontrolę.

Numatoma, kad projekto metu bus sukurtas prognozavimo modelis, skirtas prognozuoti  $\text{TiO}_2$  struktūrų paviršių antimikrobinį aktyvumą įvairioms Gram-neigiamoms bakterijoms, panaudojant save mokačias sistemas, bei atitinkama kompiuterinė programa, bus pagrindinis projekto rezultatas. Projekto rezultatai bus publikuojami šešiuose tarptautiniuose Clarivate Analytics Web of Science citavimo indeksą turinčiuose moksliniuose žurnaluose ir pristatomi šešiose tarptautinėse konferencijose. Taip pat, numatoma pateikti H2020 ar pan. tarptautinių programų projektinę paraišką pagrindinio tyrėjo, partnerio ar projekto vykdytojo teisėmis.