

**Молекулярно-динамическое моделирование Ван-дер-Ваальсовой системы из нуклеотидной цепочки с наночастицами золота в матрице углеродной нанотрубки с периодическими границами**

**Хусенов Мирзоазиз Ашурович**

*Аспирант*

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Москва,  
Россия

*E-mail: mirzo85@inbox.ru*

Показано, что расширение модели на случай периодической углеродной нанотрубки (УНТ) позволяет исследовать эффекты взаимодействия нуклеотидной цепочки (НЦ) с наночастицами золота (НЧ) в более адекватном и реалистическом приближении, исключая граничные эффекты. Ранее нами исследовались взаимодействия небольшой НЦ с НЧ золота в матрице УНТ с открытыми границами [5].

Как и в часть I [5], в системе НЦ-НЧ-УНТ в процессах парного межатомного взаимодействия частиц допускаются существования лишь Ван-дер-Ваальсовых (ВдВ) сил. Для описания ВдВ взаимодействий использован потенциал Леннарда-Джонса, а для УНТ - многочастичный потенциал Терсофа, имеющий, в общем, имеет кванто-химическую природу. Исследованы особенности молекулярных процессов взаимодействия НЦ-НЧ, обусловленной матрицей УНТ с периодическими границами с целью изучения структурных конформационных изменений в молекулярной системе и оценка динамических и энергетических характеристик системы при разных температурах среды. Выполнена серия молекулярно-динамических (МД) расчетов с разными моделями НЦ-НЧ-УНТ, исследованы процессы взаимодействия небольшая НЦ (один пиримидин - цитозин (Ц) и один пурин - гуанин (Г)) приводиться в контакт с НЧ золота и в дальнейшем прослеживаются их процессы релаксации и взаимодействия в окружении матрицей УНТ с периодическими границами. Также построены зависимости полной потенциальной энергии, угловых и торсионных (дигедральных) внутримолекулярных связей НЦ при разных температурах. Анализировались структурные и энергетические характеристики системы НЦ-НЧ-УНТ на атомно/молекулярном уровне.

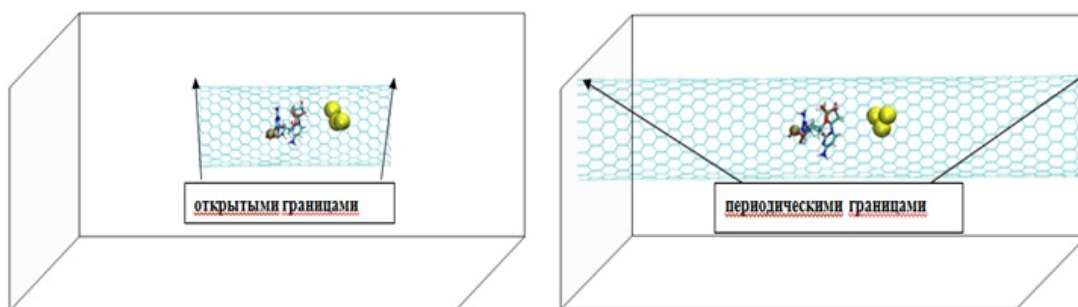
### **Источники и литература**

- 1) Smith W., Forester T.R., Todorov I.T. The DL\_POLY\_2 user manual. - Daresbury Cheshire (UK), STFC Daresbury Laboratory, 2007, 312 p.
- 2) Trouiller B., Reliene R., Westbrook A., Solaimani P., and Schiestl R.H., "Titanium Dioxide Nanoparticles Induce DNA Damage and Genetic Instability In vivo in Mice Cancer Res, 69(22), 2009.
- 3) Khusenov M., Dushanov E., Kholmurodov, K. Correlation Effect of the Van-der-Waals and Intramolecular Forces for the Nucleotide Chain-Metallic Nanoparticles Binding in a Carbon Nanotube Matrix of Periodic Boundaries. British Journal of Applied Science Technology, 2015, 8(3), pp. 313-323
- 4) Khusenov, M., Dushanov, E. and Kholmurodov, K. "Molecular Dynamics Simulations of the DNA-CNT Interaction Process: Hybrid Quantum Chemistry Potential and Classical Trajectory Approach". Journal of Modern Physics, 5, 2014, 137-144.
- 5) М.А. Хусенов, Х.Т. Холмуродов, "Молекулярно-динамическое моделирование Ван-дер-Ваальсовой системы из нуклеотидной цепочки с наночастицами золота в матрице углеродной нанотрубки". Журнал "Вестник Воронежского государственного технического университета". Воронеж 2016, №1, том 19 стр 81-87

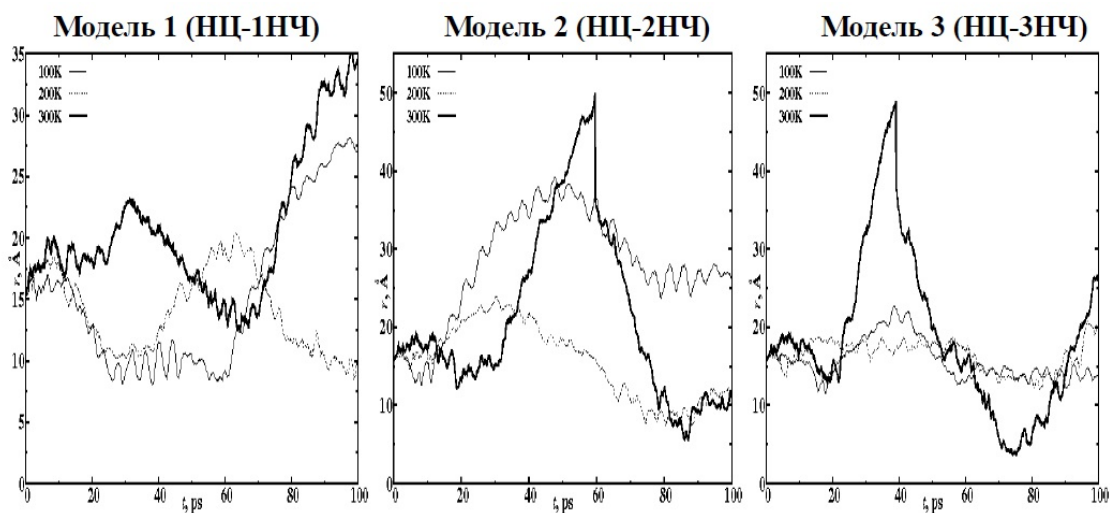
## Слова благодарности

Огромное спасибо организаторам конференции!

## Иллюстрации



**Рис. 1.** Молекулярная модель НЦ-НЧ внутри УНТ с открытыми (слева) и периодическими (справа) границами.



**Рис. 2.** Диаграмма межатомных расстояний НЦ-НЧ для периода времени от  $t = 0$  до  $t = 100$  пс, иллюстрирующие их динамику взаимодействия внутри матрице УНТ при температурах  $T=100$ ,  $200$  и  $300$  К.