

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

**Хусенов Мирзоазиз Ашурович**

*Аспирант*

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Москва,  
Россия

*E-mail: mirzo85@inbox.ru*

**АННОТАЦИЯ:** Изучение молекулярных систем типа НЦ (нуклеотидная цепочка) - НЧ (наночастицы) - УНТ (углеродная нанотрубка) представляет большой интерес для широкого спектра теоретических и прикладных проблем, например, в разработках электронных диагностических приборов, в биохимических и биотехнологических приложениях (дизайн нанороботов, механизмов для транспортировки лекарств в живой клетке, т.п.). В настоящей работе, с использованием метода молекулярной динамики (МД) смоделировано взаимодействие небольшой НЦ с НЧ золота в матрице УНТ. При этом, в системе НЦ-НЧ-УНТ в процессах парного межатомного взаимодействия частиц допускалось лишь присутствие Ван-дер-Ваальсовых (ВдВ) сил. Для описания ВдВ взаимодействий был использован парный потенциал Леннарда-Джонса. Тем не менее, для УНТ используется многочастичный потенциал Терсофа, который, в общем, имеет кванто-химическую природу. Таким образом, реализован т.н. гибридный МД метод, в котором кванто-химический потенциал взаимодействия атомов сочетается с классическими ньютоновскими траекториями движения. Нами выполнена серия МД расчетов с разными моделями НЦ-НЧ-УНТ, с целью изучения особенностей взаимодействия НЦ-НЧ, образования связей и структур в системе, а также динамических поведений в ограниченной среде, обусловленной матрицей УНТ.

### **Литература**

1. Kholmurodov Kh. (Ed.), "Molecular Dynamics of Nanobistruktures", Nova Science Publishers Ltd., 2011, 210, ISBN: 978-1-61324-320-6.
2. Dunford R., Salinaro A., Cai L., Serpone N., Horikoshi S., Hidaka H., Knowland J., &ldquo;Chemical oxidation and DNA damage catalysed by inorganic sunscreen ingredients&rdquo;; FEBS Letters, 418(1), 1997, 87-90.
3. Лоскутов А.И., Ощурко В.Б., Карпова Е.Е., Кошелева Н.В., Урюпина О.Я., Фалин А.В. Структура и трибологические свойства новых функциональных биокomпозитных материалов на основе пептида и наночастиц золота. Нанотехника. 2012. № 2. С. 59-65.
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. Breslauert K.J., Franks R., Blockers H., and Markyt L.A., "Predicting DNA duplex stability from the base sequence", Biochemistry, 83, 1986, 3746-3750.
6. SantaLucia J. (Jr.), "A unified view of polymer, dumbbell, and oligonucleotide DNA nearest-neighbor thermodynamics", Biochemistry, 95, 1998, 1460-1465.

### **Слова благодарности**

Огромные слова благодарности в Ваш адрес за организацию и проведение такое форум!