

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК С ОРГАНИЧЕСКОЙ ПЕРЕГОРОДКОЙ

Самсонов А.М.,

Чувашский госпедуниверситет, РФ, 428000, г. Чебоксары, ул.К.Маркса, д.38,
8-927-867-65-39, rulezmail@mail.ru; НИИЦ НН при Чебоксарском политехническом
институте (филиале) МГОУ. Чебоксары, ул. П. Лумумба, 8.

Компьютерное моделирование биофизических процессов приносит ощутимую пользу в тех случаях, когда вследствие сложности и дороговизны эксперимента оказывается целесообразным получение предварительных оценок для выбора оптимальных путей его постановки. Иначе говоря, компьютерное моделирование представляет собой некоторый третий путь решения проблемы, имеющей важное теоретическое и технологическое значение.

Создание потоков частиц, направляемых нанотрубкой, может найти применение как способ доставки химических веществ в биологические клеточные структуры [1]. Нанотрубки можно рассматривать как молекулярные путепроводы, предназначенные для транспортировки в зону реакции необходимого реагента, что невозможно с той же точностью выполнить другими способами. В частности, важно знать закономерности взаимодействия углеродных нанотрубок с мембраной клетки. Все эти задачи должны решаться с применением предварительного анализа при помощи компьютерного моделирования

В работе средствами компьютерного моделирования на примере глюкозы, анализируются некоторые вопросы накопления органических молекулярных структур в углеродных нанотрубках. При моделировании было выявлено такое явление, как структуризация - упорядочивание молекул, в данном случае молекул глюкозы внутри углеродной нанотрубки из-за специфического чередования атомов углерода (хиральности). Приведена модель взаимодействия нанотрубки с углеродными и другими органическими перегородками.

Литература

1. *Gianni Ciofani*, et al. Boron nitride nanotubes: An innovative tool for nanomedicine // *Nanotoday*, Volume 4, Issue 1, February 2009