

УДК 577

Л.С.Денисова (4 курс, каф. БФ), П.П.Якуцени, д.б.н., проф.

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ КАК МОДИФИКАТОРЫ УГЛЕВОДОВ

Создание гибридных структур фуллеренов и нанотрубок с биомолекулами позволит сочетать новейшие технологии наноуглерода с удивительной функциональностью биосистем.

Предпринята попытка определить возможность существования комплексов полисахаридов с фуллеренами и нанотрубками. Методами молекулярной механики изучена пространственная архитектура, выявлены ожидаемые свойства рассмотренных надмолекулярных систем. Моделировалось взаимодействие с различными биологически важными конфигурациями полимеров глюкозы. Наиболее интересные результаты были получены для кольцеобразных и спиралеобразных форм углеводов.

Для фуллеренов показано возникновение самоорганизующихся структур, в которых молекулы C_{60} концентрируются на расстоянии 5-6 Å от центра кольца. Энтальпия образования достигала 20-25 ккал/моль, что с учетом трансляционной и вращательной подвижности молекул соответствовало 8-12 ккал/моль свободной энергии связывания. Влияние воды или иных растворителей не учитывалось. В случае спиралеобразных структур наблюдалась аналогичная ситуация. Фуллерены концентрировались в области устья углеводной трубки, например, амилозы. Проникновение во внутреннее пространство данной структуры было затруднено значительным энергетическим барьером, в то время как само пребывание в ней было энергетически выгодным. Связывание с внешней боковой поверхностью углеводной трубки оказывалось менее выраженным. Обнаружены значительные искажения конформационной структуры полисахарида, сохраняющиеся после удаления фуллеренов из моделируемой системы.

Углеродные нанотрубки взаимодействуют с вышеперечисленными структурами еще более выражено. Энтальпийная составляющая энергии связывания с одиночным витком полисахаридной спирали достигала 37 ккал/моль, или 14-16 ккал/моль свободной энергии связывания без учета влияния растворителя. Располагаясь вдоль центральной оси витка, нанотрубка сохраняла свободу вращательного и колебательного движения. Вращательное движение представляло собой прецессию вокруг собственной оси, сопровождающуюся нутацией. Угол последней составлял 12-15°. Энергетические барьеры колебательного и вращательного движения не превышали 0,1 ккал/моль.

Полученные данные открывают возможность направленного конструирования и практического создания молекулярных систем, предназначенных для развития элементной базы наноустройств и наноматериалов с управляемыми свойствами.

Факт взаимодействия фуллеренов и нанотрубок с углеводами определяет новые подходы к разработке биологически активных веществ.