

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ С КЛЕТОЧНОЙ МЕМБРАНОЙ

Самсонов А.М., Филиппов Г.М.¹

Чувашия, г.Чебоксары, ЧГПУ им. И. Я. Яковлева

¹Чувашия, г.Чебоксары, ЧПИ(ф) МГОУ

В работе средствами компьютерного моделирования анализируются некоторые вопросы взаимодействия углеродной нанотрубки с клеточной мембраной. 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. 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 анализируются средства и инструменты моделирования биологических структур, приводится их сравнительный анализ. На основе анализа выбрана наилучшая среда расчетов методом молекулярной механики. Произведен расчет взаимодействия углеродной нанотрубки с клеточной мембраной. Рассмотрены трубки различного диаметра и хиральности, как закрытого типа, так и открытого. Рассмотрены проблемы токсичности нанотрубок. Приводится обзор научных статей, касающихся тематики исследования.