

## ИССЛЕДОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОЛЛАГЕНА С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

И.А. Какорин, студент

Волгоградский государственный университет  
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2023-5-5-47-49

**Аннотация.** В работе представлены теоретические исследования процесса взаимодействия углеродной нанотрубки (6,6) и молекулы гидроксипролина, входящую в структуру коллагена. Исследованы различные варианты расположения фрагмента над поверхностью УНТ. Установлено, что на процесс адсорбции оказывают влияние первоначальное расположение молекулы над трубкой. Расчеты выполнялись с помощью квантово-химического метода MNDO.

**Ключевые слова:** углеродная нанотрубка, молекула коллагена, процесс адсорбции, молекула гидроксипролина, метод MNDO.

Коллаген, самый распространенный белок в организме человека, играет решающую роль в обеспечении структурной поддержки тканей и органов. Углеродные нанотрубки (УНТ) – наноразмерные структуры с исключительными механическими, электрическими и тепловыми свойствами. Взаимодействие между коллагеном и УНТ привлекло значительное внимание в научном сообществе из-за его потенциального применения в различных областях, включая тканевую инженерию, системы доставки лекарств и биосенсоры. Коллаген представляет собой волокнистый белок, в изобилии содержащийся в соединительных тканях, таких как кожа, кости, сухожилия и хрящи. Он обеспечивает прочность, гибкость и структурную целостность этих тканей, что делает его важным компонентом внеклеточного матрикса. Коллаген состоит из трех полипептидных цепей, скрученных вместе, образующих структуру тройной спирали, известную как коллагеновая фибрилла [1-2].

Углеродные нанотрубки представляют собой цилиндрические структуры, состоящие из атомов углерода, расположенных в гексагональной решетке. Они обладают замечательной механической прочностью, высокой электропроводностью и отличными тепловыми свойствами. УНТ могут быть одностенными (ОУНТ) или многослойными (МУНТ) в зависимости от количества концентрических углеродных сло-

ев. Одним из ключевых аспектов взаимодействия тубуленов с коллагеном является способность УНТ выступать в качестве армирующих материалов для композитов на основе коллагена. Путем включения УНТ в коллагеновые матрицы исследователи стремились улучшить механические свойства коллагена, сделав его более прочным и долговечным. Эти композиты показали себя многообещающе в таких приложениях, как каркасы тканевой инженерии и заживление ран.

Кроме того, УНТ продемонстрировали способность способствовать клеточной адгезии и росту при интеграции с коллагеновыми матрицами. Уникальные поверхностные свойства УНТ, такие как их большая площадь поверхности и поверхностный заряд, могут способствовать адгезии и пролиферации клеток [3-4]. Это свойство привело к разработке гибридных материалов УНТ-коллаген для регенерации тканей, где нанотрубки способствуют клеточным взаимодействиям и обеспечивают структурную поддержку. УНТ также исследовались для систем доставки лекарств в сочетании с коллагеном. Большая площадь поверхности УНТ позволяет эффективно загружать и высвобождать терапевтические агенты, а коллагеновая матрица обеспечивает биосовместимость и свойства контролируемого высвобождения. Эта комбинация предлагает инновационный подход к адресной доставке ле-

карств и может произвести революцию в области медицины.

Коллаген, как и все остальные белки, состоит из аминокислот. В его состав входит большой процент глицина, аналана, гидроксипролина, пролина, глутаминовой кислоты, аргинина, серина. Молекула фибриллярного белка имеет вид трех цепей, правозакрученных в спираль. Коллагеновые волокна прочны, и почти не подвержены растяжению. Таким образом молекула коллагена состоит из разных составляющих. Для получения детальной информации о взаимодействии молекулы коллагена с УНТ необходимо изучить

процесс взаимодействия каждой структуры с поверхностью трубки. Для примера рассмотрим процесс взаимодействия гидроксипролина с углеродной нанотрубкой. Для этого необходимо было построить и выбрать оптимальную модель структурной единицы гидроксипролина  $C_5H_9NO_3$ . Для определения оптимальной структуры были выполнены расчеты геометрии системы с использованием полуэмпирического метода MNDO. Структурная формула гидроксипролина представлена на рис. 1а. В результате расчетов были определены геометрические особенности данной структурной единицы (рис. 1б).

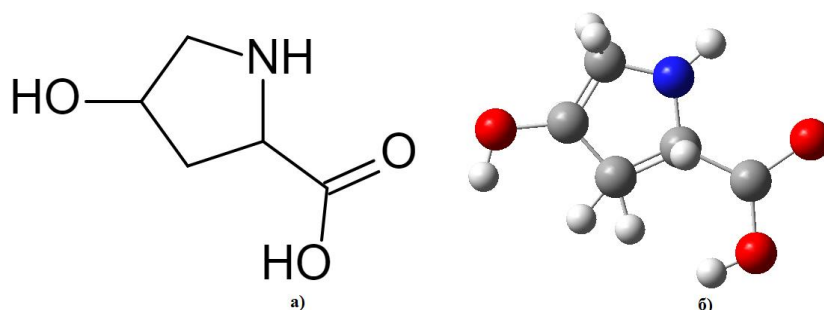


Рис. 1. Молекула  $C_5H_9NO_3$ : а) структурная формула; б) структура, рассчитанная с оптимизацией параметров

В качестве объекта исследования выбрана углеродная нанотрубка (6,6), которая моделировалась молекулярным кластером, расширенная элементарная ячейка (РЭЯ) которого содержала 240 атомов углерода. Расстояние между атомами углерода трубки составляет 1.4 Å. Оборванные

связи на границе кластера замыкались псевдоатомами водорода. Рассмотрены два положения молекулы гидроксипролина относительно поверхности УНТ – поперечная и продольная ориентации (рис. 2а,б).

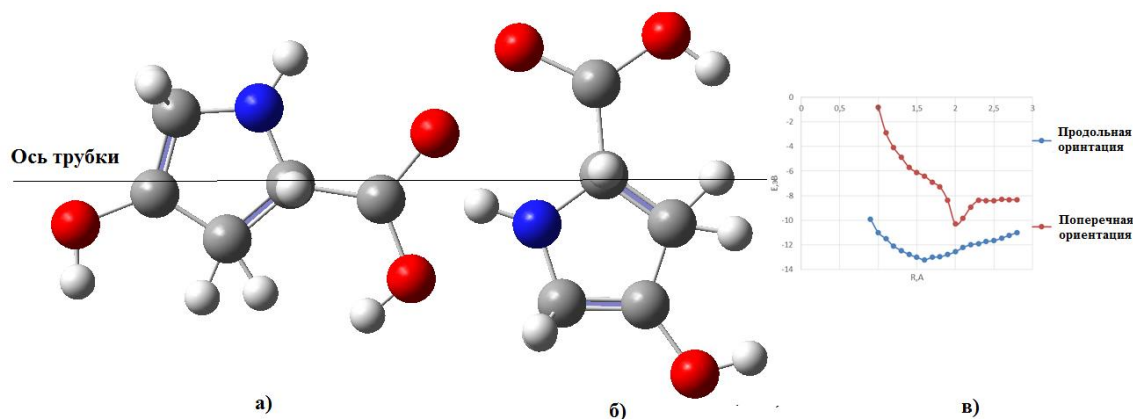


Рис. 2. Расположение молекулы гидроксипролина над углеродной трубкой: а) продольная ориентация; б) поперечная ориентация; в) изменение энергии при взаимодействии  $C_5H_9NO_3$  с углеродной нанотрубкой (6,6)

Процесс адсорбции моделировался пошаговым приближением  $C_5H_9NO_3$  с шагом  $0,1 \text{ \AA}$  к поверхности углеродной НТ. Геометрия системы оптимизировалась на каждом шаге. Выполненные расчеты позволили построить профили поверхности потенциальной энергии процессов адсорбции (рис. 2в) для поперечной и продольной ориентации молекулы гидроксипролина. Анализ энергетических кривых установил, что структурная единица адсорбируется на поверхности трубки, что подтверждается наличием минимума на энергетических кривых. Следует заметить, что образование химической связи между атомами молекулы гидроксипролина и атомами трубки наблюдается только при

продольном расположении гидроксипролина относительно поверхности тубулена. Молекула гидроксипролина безбарьерно подходит к УНТ, на расстоянии около  $2 \text{ \AA}$ , одна сторона поворачивается и присоединяется атомом углерода к атому трубки, при этом на противоположной стороне еще один атом углерода образует двойную связь с атомом тубулена. Длина связи C-C равна  $1,44 \text{ \AA}$ . Энергия адсорбции составила  $13,21 \text{ эВ}$ . В случае расположения молекулы перпендикулярно трубки на графике также отчетливо прослеживается энергетический минимум на расстоянии  $2 \text{ \AA}$ , что соответствует физической адсорбции, энергия которой равна  $10,3 \text{ эВ}$ .

#### Библиографический список

1. Синтез и физико-химические характеристики нанокompозитов гидроксиапатит кальция/многостенные углеродные нанотрубки/коллаген / Ж.А. Ежова, Н.А. Захаров, Е.М. Коваль, В.Т. Калинин // Журнал неорганической химии. – 2013. – Т. 58, № 10. – С. 1316. – DOI 10.7868/S0044457X13100085.
2. Нано- и микроволокнистые материалы на основе коллагена для тканевой инженерии: получение, структура и свойства / Т.Х. Тенчурин, Л.П. Истранов, Е.В. Истранова [и др.] // Российские нанотехнологии. – 2018. – Т. 13, № 9-10. – С. 25-34. – DOI 10.1134/S1992722318050047.
3. Нанотубулярные композиты и их полуэмпирические исследования / И.В. Запороцкова, Е.В. Перевалова, Е.В. Прокофьева, О.А. Давлетова // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2006. – № 2. – С. 4-14.
4. Исследование процесса адсорбции биологически активных веществ, содержащих дифенилоксидный фрагмент, на внешней поверхности углеродных нанотрубок / А.А. Кравченко, Т.А. Ермакова, И.В. Запороцкова [и др.] // На стыке наук. Физико-химическая серия: Материалы II Международной научной Интернет-конференции: в 2 томах; составитель Д.Н. Синяев, Казань, 28 января 2014 года / Сервис виртуальных конференций Рах Grid; ИП Синяев Дмитрий Николаевич. Том 2. – Казань: Индивидуальный предприниматель Синяев Дмитрий Николаевич, 2014. – С. 4-7.

## INTERACTION OF FLUORINE AND CHLORINE MOLECULES WITH PYROLYZED POLYACRYLONITRILE

**I.A. Kakorin, Student**  
**Volgograd State University**  
**(Russia, Volgograd)**

**Abstract.** *The paper presents theoretical studies of the interaction of a carbon nanotube (6,6) and a hydroxyproline molecule that is part of the collagen structure. Various variants of the fragment's location above the CNT surface have been investigated. It was found that the adsorption process is influenced by the initial location of the molecule above the tube. Calculations were performed using the MNDO quantum chemical method.*

**Keywords:** *carbon nanotube, collagen molecule, adsorption process, hydroxyproline molecule, MNDO method.*