

Многоуровневая модель самоорганизации наночастиц и биомолекул

Аспирант кафедры биофизики СФУ
И.А. Денисов

Руководитель:
д.ф.-м.н. П.И. Белобров

«Наноматериалы и Нанотехнологии»
г. Красноярск, 3 октября 2012г.

Самосборка для нанотехнологии

Сборка структур и агрегатов

Поатомный метод

Самосборка

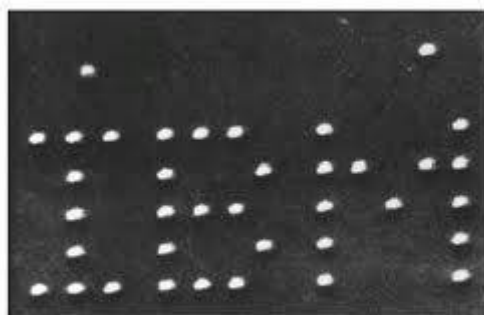


Fig. 2.25. IBM logo spelled out using 35 xenon atoms arranged on a nickel surface by an STM (courtesy of IBM Research Division).

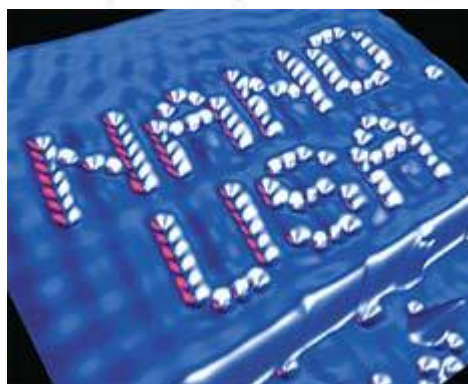
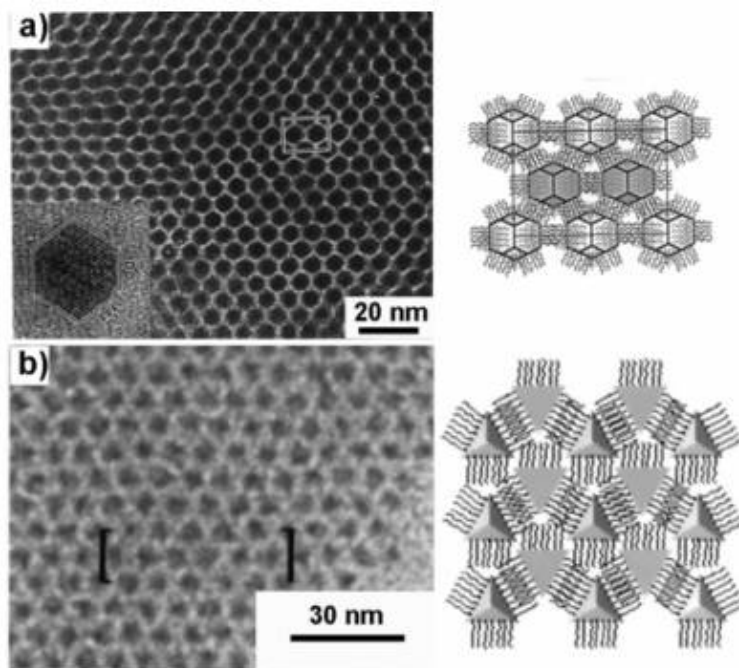


Рис. 1. Заря нанотехнологии

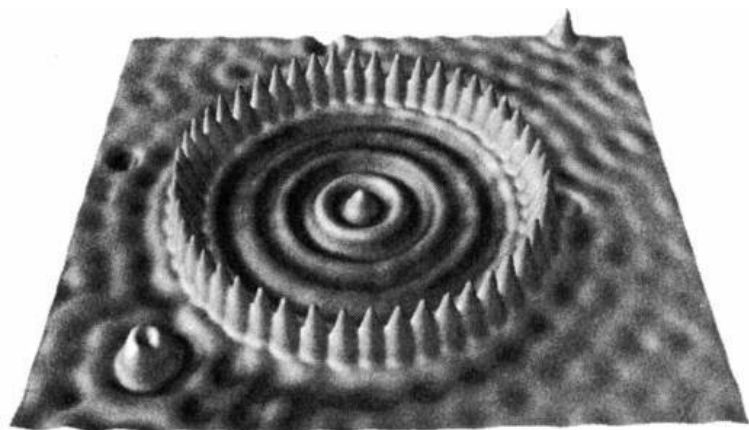


Love J.C. et al. Self-assembled monolayers of thiolates on metals as a form of nanotechnology. // Chemical reviews. 2005. Vol. 105, № 4. P. 1103–1169.

Рис. 2. Самосборка наноструктуры

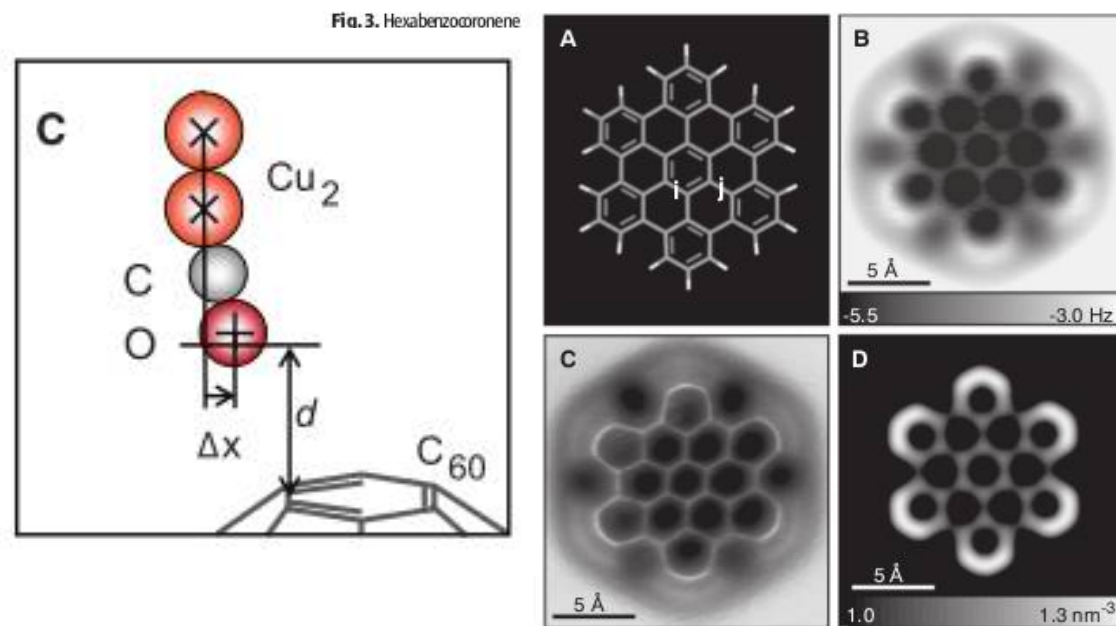
Дизайн процесса самосборки = точное знание свойств элементов + моделирование процесса сборки

Сегодня структура материи постижима как никогда ранее



Crommie M., Lutz C., Eigler D. Confinement of electrons to quantum corrals on a metal surface // Science. **1993**. Vol. 262, № 5131. P. 218–220.

Рис. 3. Квантовый «загон»



Gross L. et al. Bond-Order Discrimination by Atomic Force Microscopy // Science. **2012**. Vol. 337, № 6100. P. 1326–1329.

Рис. 4. Сканирование хим связей

Уровни организации материи

«Выделять отдельный уровень организации целесообразно в том случае, если на нем возникают новые свойства, отсутствующие у систем нижележащего уровня».



Рис. 5. Уровни организации
(из лекции Ф. Кондрашова)

Цель и задачи

???

создать
многоуровневую
модель
самоорганизации

???

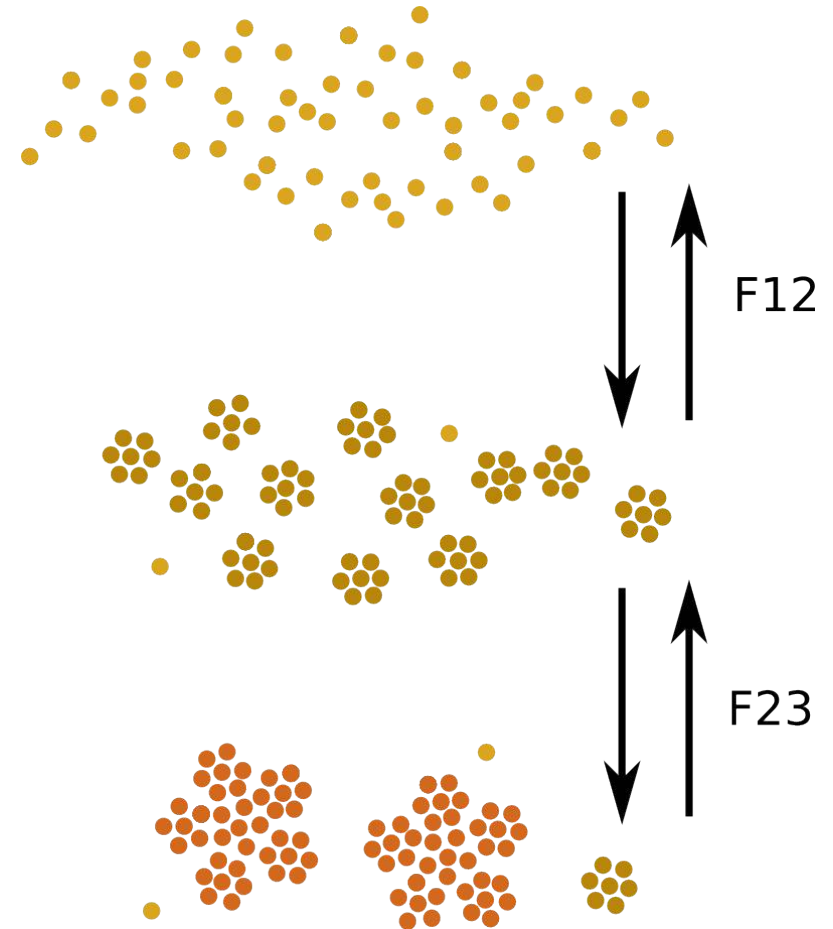


Рис. 6. Многоуровневая структура

Биологические примеры организации

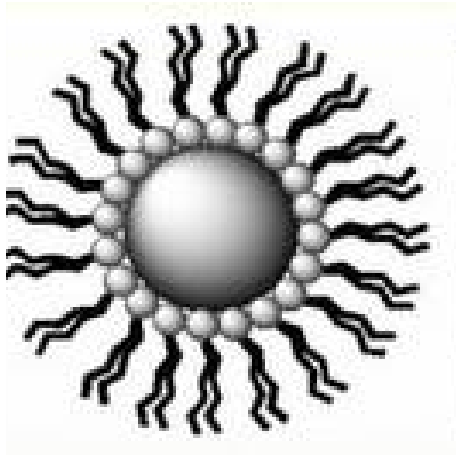


Рис. 7. Мицеллы и липосомы

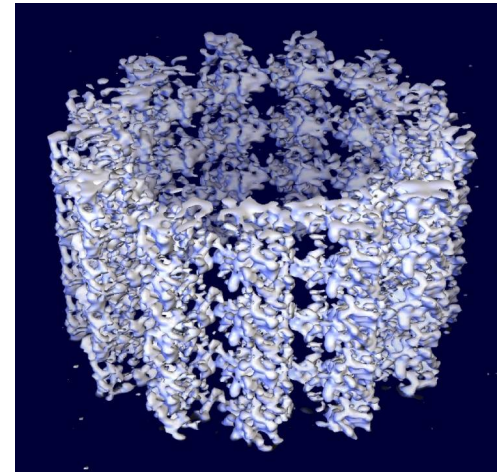


Рис. 8. Микротрубочки и микрофиламенты

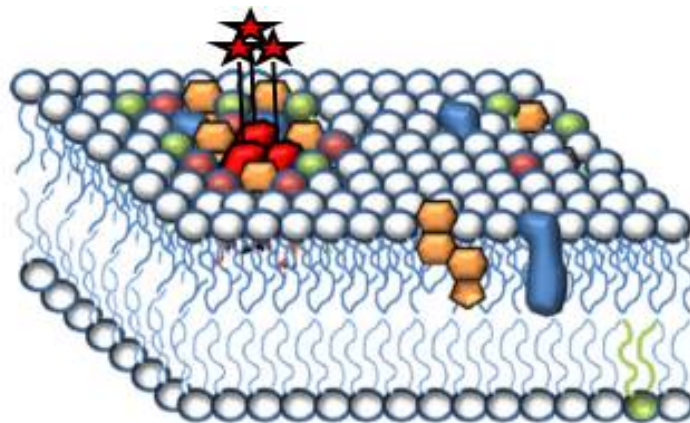


Рис. 9. Липидные рафты

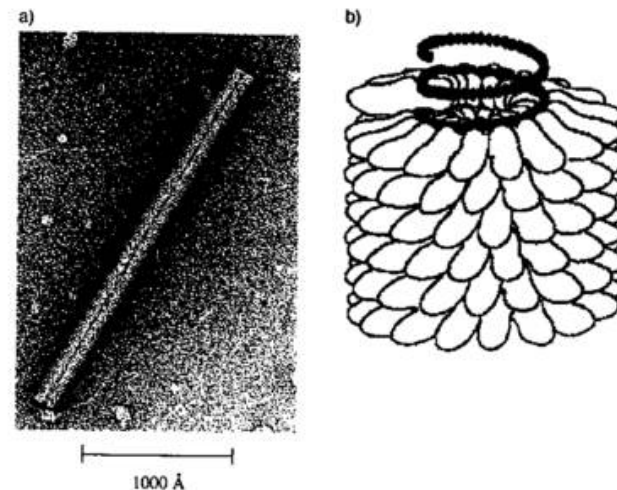


Рис. 10. Оболочка вируса табачной мозаики

Предыстория модели

Теоретическое исследование поверхностных состояний электрона в **наночастицах алмаза**. Рождение коллективного эффекта (нового свойства) на примере коллективного электрона Тамма.

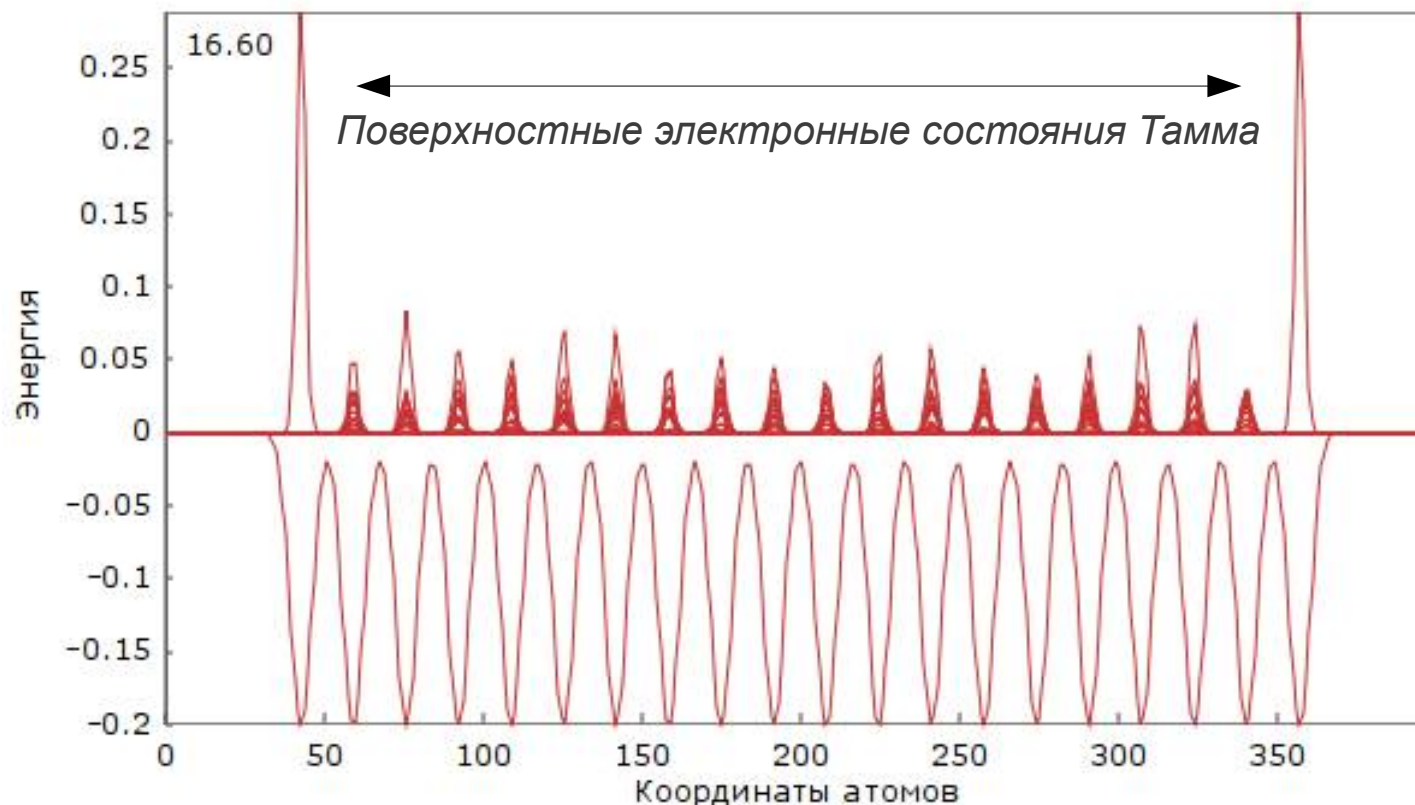


Рис. 11. Поверхностные электронные состояния в период. потенциале.

Предыстория модели

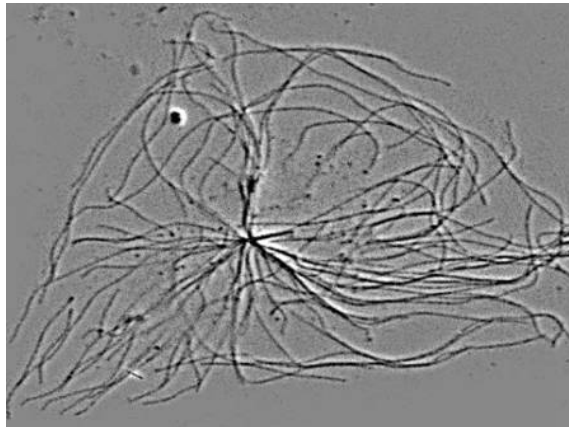


Рис. 12. Микротрубочки в клетке

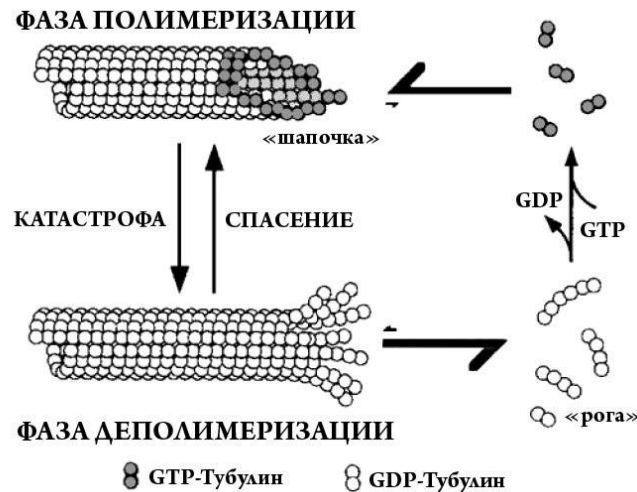


Рис. 13. Сборка микротрубочек

Модель роста цитоскелета с диффузией тубулина, белка составляющего цитоскелет.

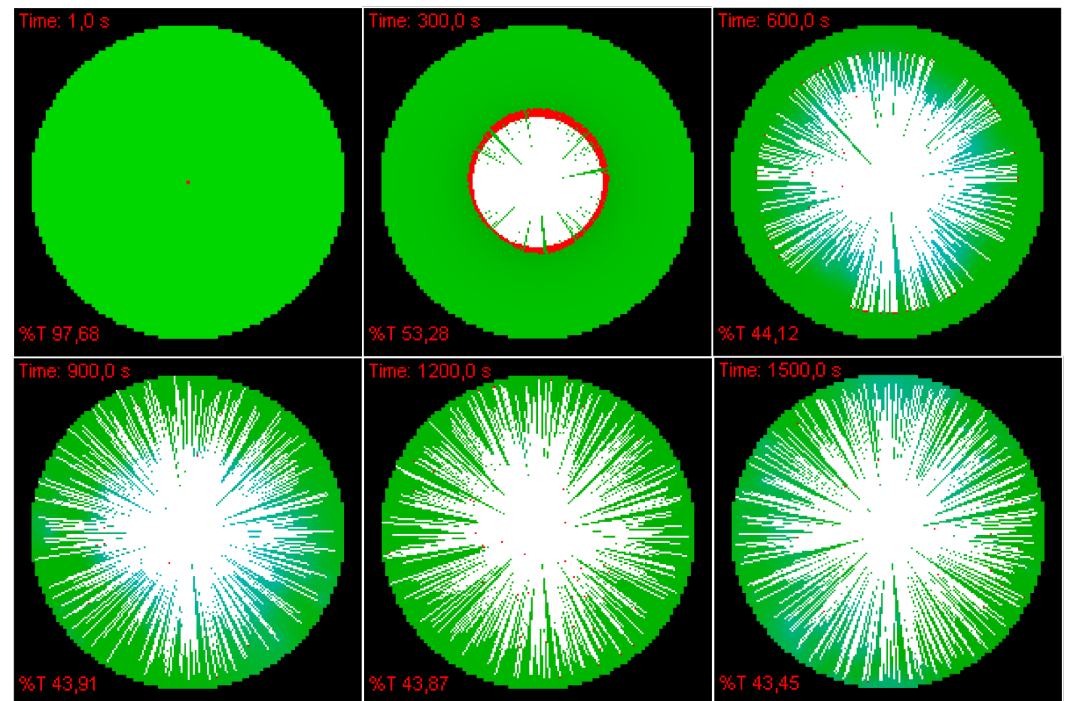
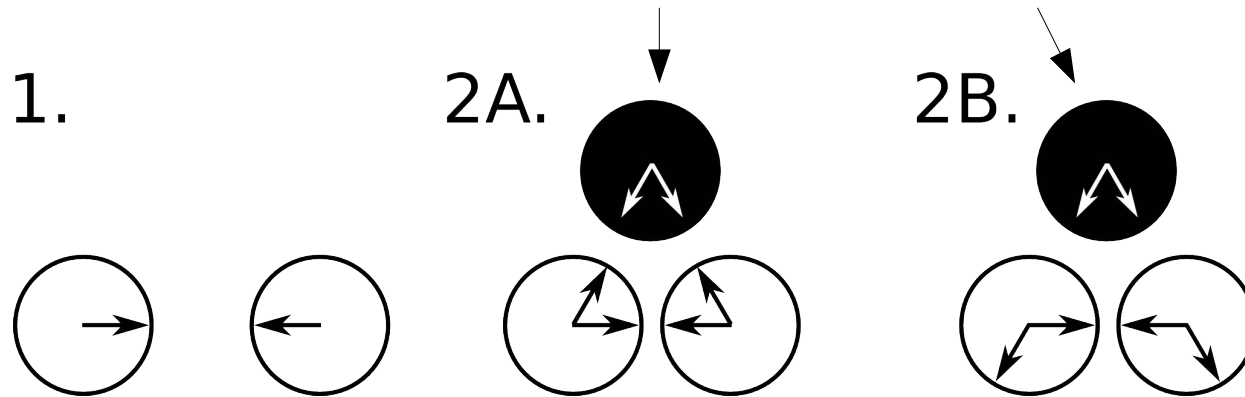


Рис. 14. Модель роста цитоскелета

Многоуровневая модель организации

Объект организации



Частица + Квазичастица + Узел

Атом + Молекула + Клетка + Ткань

Рис. 15. (1) два объекта на уровне организации n сближаются, (2) при достижении заданного расстояния рождается коллективный эффект (частица на уровне $n+1$), такой объект может как стабилизировать (2А) так и дестабилизировать (2В) связь объектов на уровне n .

Многоуровневая модель организации

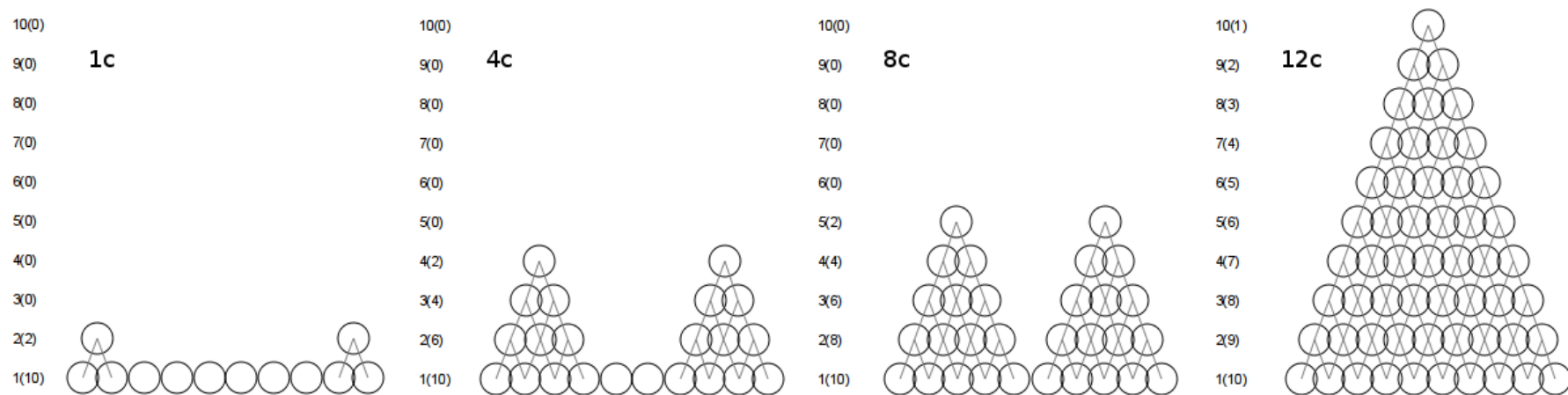


Рис. 16. Объединение частиц и рождение новых уровней организации.



Рис 17. Формирование упорядоченной периодической структуры из случайно распределенных объектов.

Исследование модели

BlackBox

Файл Правка Шрифт Инфо Разработка Инструменты Диалоги Обработка Нейросеть Окна Помощь

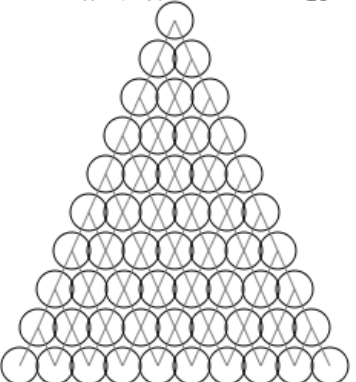
Рабочий журнал

Многоуровневая модель организации

Многоуровневая модель, И.Денисов d.ivan.krsk@gmail.com

10(1)
9(2)
8(3)
7(4)
6(5)
5(6)
4(7)
3(8)
2(9)
1(10)

t: 11.56 c



(Levels)Main

```
END Start;  
  
BEGIN  
  
(* Параметры модели *)  
N := 10; (* Количество частиц на первом уровне *)  
L := 10; (* Количество уровней *)  
genRad := 1; (* На каком расстоянии создается объект организации *)  
vis := 0.04; (* Вязкость, характеристика потери скорости *)  
T := 0; (* Температура *)  
  
(* Параметры потенциалов *)  
k1 := 2000; (* Внутри уровня n *)  
k2 := - 10 * k1; (* n + 1 *)  
k3 := - 10 * k1; (* n - 1 *)  
k4 := - 10; (* n + 1 дочерние *)  
k5 := - 10; (* n - 1 родительские *)  
  
(* Параметры расчетов *)  
dt := 0.001; (* Шаг по времени *)  
IYStep := 25; (* Шаг по картинке для одного уровня *)  
fps := 25; (* Сколько кадров отображать *)  
record := FALSE;  
[ (* on *) ] (* Создавать частицы или нет *)  
  
(* Параметры отображения *)  
xsize := N * (IYStep DIV 2 + 1) + 300; (* Размеры окошечка *)  
ysize := IYStep * (L + 1);  
color := Ports.RGBColor(250, 250, 250);  
font := Fonts.dir.This("Arial", 8 * Ports.point, {}, Fonts.normal);  
font2 := Fonts.dir.This("Arial", 5 * Ports.point, {}, Fonts.normal);  
  
END LevelsMain.
```

www.molpit.com

Выводы

- Описана модель многоуровневой организованной системы для обсуждения уровней организации и **создания моделей сборки наноструктур и агрегатов.**
- Ведено понятие «объект организации» для описания динамики многоуровневых биологических систем. Это позволяет, не усложняя потенциал и не вводя искусственных правил рождения новых свойств, обсуждать процессы организации.

Примеры

- Биологические: липидные рафты, цитоскелет.
- Физические: наноалмаз, композиты из наноалмаза.