

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ САМООРГАНИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ

Белобров П.И.

Группа молекулярного зодчества, Сибирский Федеральный Университет, Институт физики и биофизики СО РАН, Академгородок 50, Красноярск, 660036, Россия
peter.belobrov@gmail.com

Развиты методы теоретического описания надмолекулярных систем, основанные на теории основного и устойчивых состояний физических моделей самосборки наночастиц для анализа и синтеза агрегатов наночастиц с организованными комплексами биомолекул.

Показано, что основное состояние кубического диполика формируется из четырех подрешеток и имеет непрерывное вырождение по двум параметрам. В двумерных диполиках остается непрерывное вырождение по одному параметру, а в одномерных - вырождение снимается полностью. Показано, что основное состояние дипольной системы в плоской гексагональной решетке является одиночным макровихрем, а ферромагнитное состояние метастабильное и неустойчиво относительно длинноволновых флуктуаций.

Проведена классификация всех решений динамической системы и соответствующих типов структур (положения равновесия одномерной цепочки) в ориентационных моделях самоорганизации во внешнем поле методом эквивалентной нелинейной динамической системы. Найдены основное состояние и равновесные структуры резонансного типа дискретной модели взаимно подстраивающихся ориентациями молекулярных цепочек при самоорганизации двойных спиралей. Показано, что эффекты дискретности проявляются в том, что возникают метастабильные хаотические структуры, обусловленные перекрытием резонансов в эквивалентной динамической системе при достаточно сильном различии устойчивых периодов каждой из свободных комплиментарных цепей в двойной спирали.

Показано, что учет нерезонансного члена при взаимодействии двухуровневых наночастиц с самосогласованным полем излучения приводит к появлению стохастических траекторий движения при отсутствии в системе каких-либо случайных параметров. Найдены условия возникновения стохастического возбуждения высоколежащих уровней многоуровневых наночастиц (супермолекул или квантовых нелинейных осцилляторов), взаимодействующих с собственным полем излучения и с внешним когерентным полем лазерного излучения. Показано, что в области стохастичности движения происходит существенная перестройка функции распределения населенностей уровней.

На основе конформационных расчетов введено представление о химическом сигнале или кляксе как случайном векторном поле биомолекул или наночастиц. Получены уравнения для корреляционного и спектрального тензоров флуктуирующей кляксы, образованной полем надмолекулярного комплекса. Для случая аксиальной симметрии решены уравнения для определяющих функций и найдены спектральные тензоры электромагнитного поля кляксы.

Построена математическая модель функционирования редуктазы и люциферазы, позволившая определить и оптимизировать эффективность работы этой биферментной системы. Сформулирован физический механизм биолюминесценции, состоящий в разделении зарядов при химическом возбуждении организованной надмолекулярной структуры белка, субстратов и растворителя.

Теоретический анализ моделей надмолекулярной самоорганизации применен для ленточных пленок бактериальной люциферазы и устойчивых микроэмульсий, в которых псевдофаза воды наиболее предпочтительна для соллюбилизации наноалмаза.

Для понимания основных различий между мембранными, капиллярными и другими типами распределенных биологических барьеров сформулированы проблемы физической теории биологических барьеров. Обсуждаются условия, когда в многофазных системах межфазные контакты, разветвления, мембраны и наночастицы «организуют» барьер между подсистемами. Физическое, химическое и биологическое описание свойств таких барьеров являются основной проблемой современной нанобиофизики.