

Молекулярно-динамическое моделирование эффектов ориентации и адсорбции лизоцима на поверхности полиэтилентерефталатных плёнок

Научный руководитель – Холмуродов Холмирзо Тагойкулович

Хамзин Эльхан Халитович

Аспирант

Государственный университет «Дубна», Факультет естественных и инженерных наук,
Дубна, Россия

E-mail: rezerford9327@mail.ru

Круг вопросов, затрагивающих поверхностные явления достаточно обширен: от биологического происхождения (белки, липиды) до технологических и производственных задач (электроника, суспензии). Ориентация белков описывает поведение гидрофобных и ионных взаимодействий в адсорбции, эффекты скручивания и раскручивания полимерной цепи белка, возникающие в поверхностных явлениях. Адсорбция же является одной из наиболее известных разновидностей поверхностных явлений. Процессы адсорбции чрезвычайно распространены в природе и нашли широкое применение в химии и технологии. Теоретические положения адсорбции служат основой развития современных теорий гетерогенного катализа, кинетики гетерогенных процессов, строения двойного электрического слоя и электрохимической кинетики, хроматографии, ионного обмена, агрегативной устойчивости дисперсных систем. Помимо фундаментальной значимости особую роль занимают прикладные исследования ориентационных эффектов и адсорбционных свойств белков на полимерных и электродных материалах. Целью настоящей работы является постановка молекулярно-динамических исследований с целью изучения процессов ориентации и адсорбции белка лизоцима (рис.1) на поверхности полиэтилентерефталатных пленках (рис.2), а также описание физико-химических процессов, способных повлиять на ориентационные и адсорбционные свойства белка.

Иллюстрации

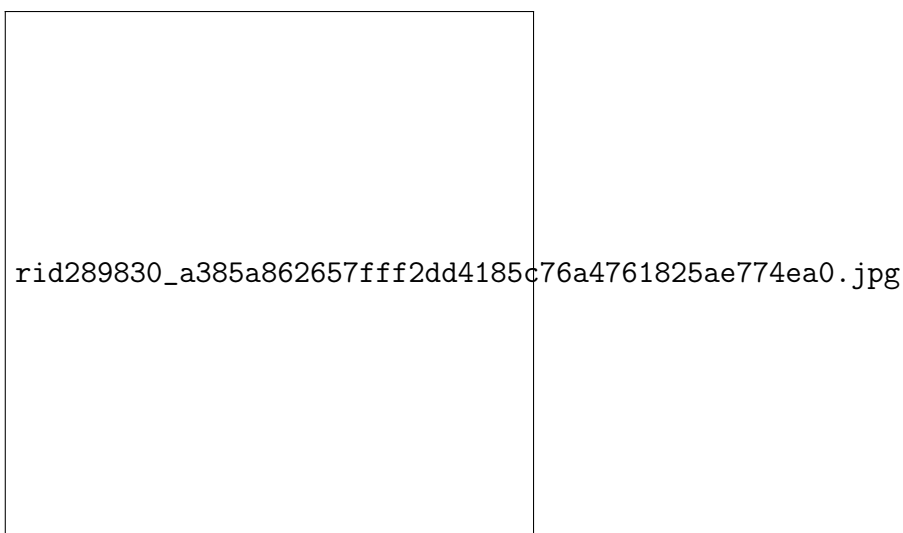


Рис. 1. Белок лизоцим в водной оболочке



Рис. 2. поверхность полиэтилентерфталата