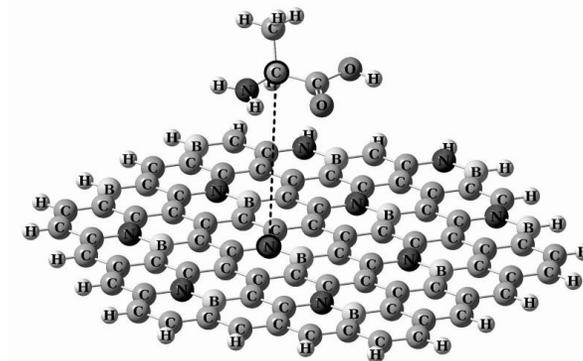
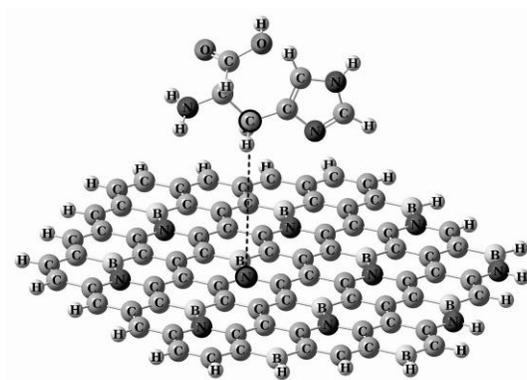
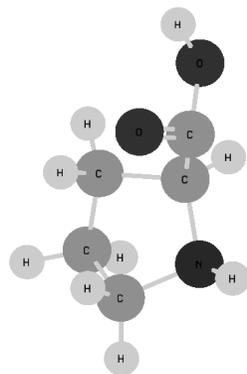


Комилджонов М. Н., Борознина Е.В.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДВУМЕРНОГО СЛОЯ ВСN С ПРОЛИНОМ, АЛАНИНОМ И ГИСТИДИНОМ



Волгоградский государственный университет

2022

Тема нашего исследования является важным элементом в понимании физикохимии взаимодействия аминокислот (АК) и двумерных наноструктур, которые все чаще находят свое применение в нанобиотехнологии и наномедицине. Объектом исследования стал двумерный слой BCN, полученный в 2017 году [1]. 2D BCN обладает более высокой энергией связи, чем графен и нитрид бора [2], а его проводящие характеристики зависят от концентрации B-N связей.

Двумерный карбо-нитрид бора (BCN) представляет собой графеноподобную сетку, которая в последнее время привлекает большое внимание благодаря своей способности настраиваться по целому ряду химических, оптических и электрических свойств в зависимости от взаимного расположения атомов в структуре и их количественного отношения. В последнее десятилетие структуры BCN широко исследовались для многих применений, связанных с энергетикой, от суперконденсаторов и литий-ионных батарей до электрокатализаторов и датчиков [3].

Были исследованы АК аланин ($C_3H_7NO_2$), гистидин ($C_6H_9N_3O_2$), входящие в состав популярной биологической активной добавки (БАД) – карнозина – дипептида, обладающего уникальным мультимодальным защитным эффектом против деградации белков и старения клеток [4], а также пролин ($C_5H_9NO_2$), который может действовать как сигнальная молекула для модуляции функций митохондрий, влияния на пролиферацию или гибель клеток и запуска экспрессии определенных генов, которые могут быть важны для восстановления растений [5]. Расчеты выполнены методом теории функционала плотности с функционалом V3LYP [6, 7]. Рассматривался молекулярный кластер (МК) BСN [8].

В качестве центров адсорбции выбраны центральные атомы слоя (В, С, N) и вакансии структуры BСN, пролин приближался к слою атомом кислорода (рис. 1). В результате пошагового приближения пролина к слою, нами были получены профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия слоя с молекулой (рис. 2) в положении над атомами слоя (В, С, N) (рис. 3), графики качественно подобны. Отсутствие четко выраженного минимума потенциальной энергии свидетельствует об отсутствии создания адсорбционного комплекса между структурами при данном варианте их взаимного расположения.

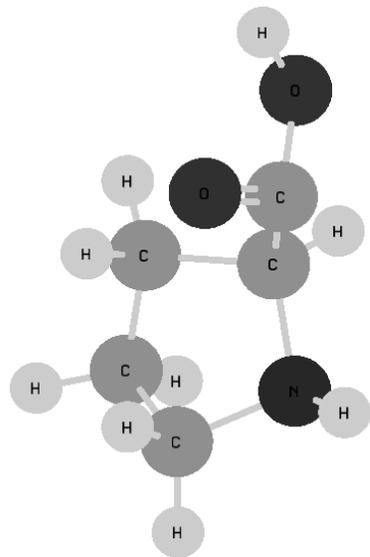


Рисунок 1. Пролин

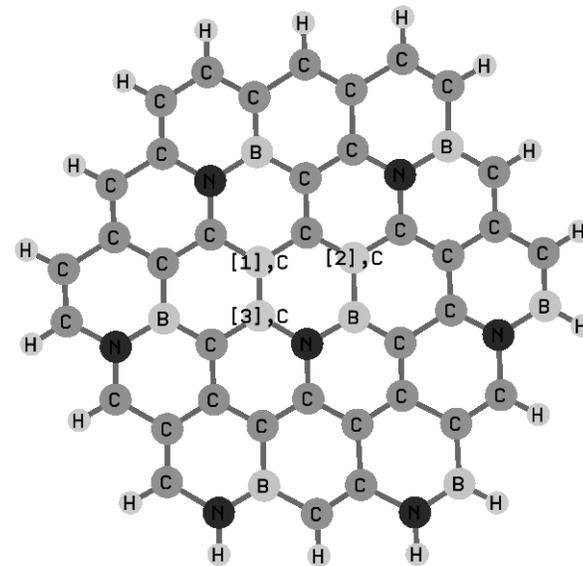


Рисунок 2. Структура BСN (цифрами 1, 2, 3 показаны атомы, к которым осуществлялось приближение пролина)

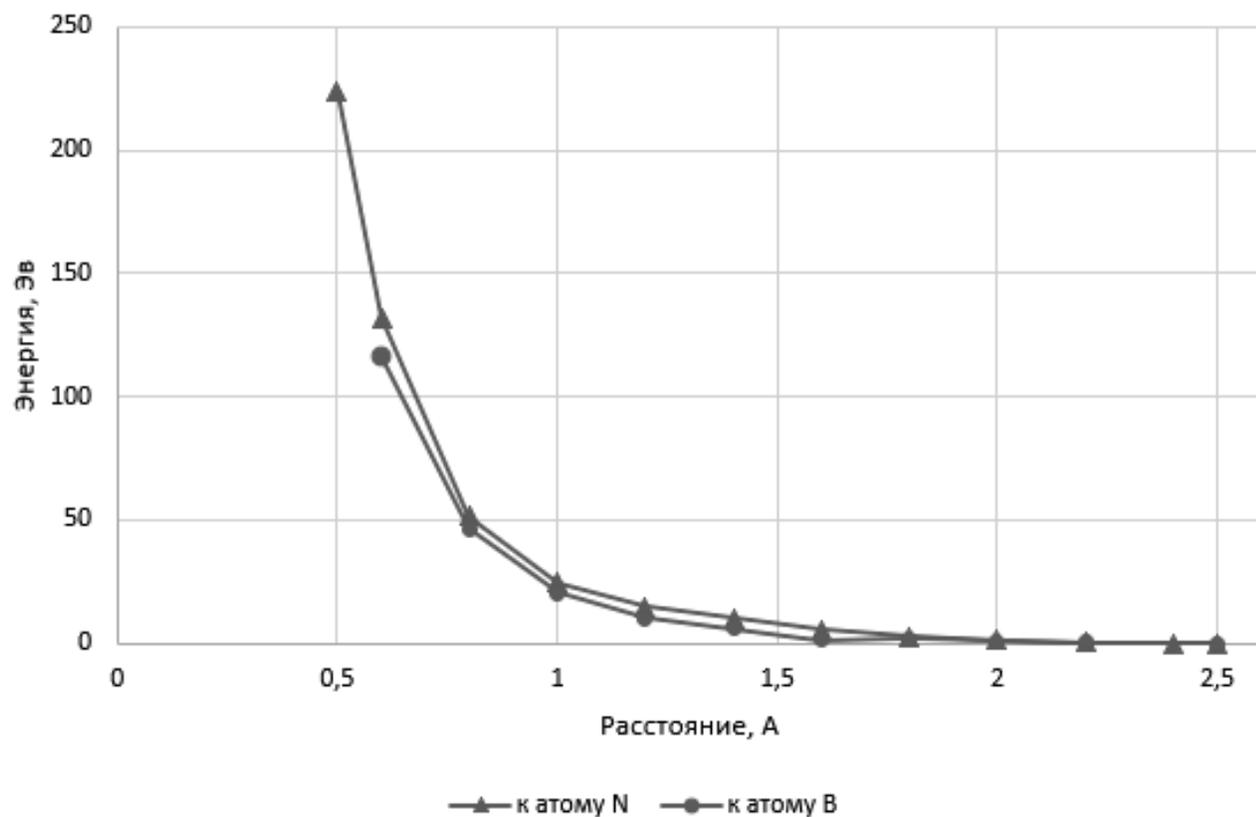


Рисунок 4 . Профили потенциальных энергий взаимодействия атомов пролина с двумерным слоем VCN

В качестве адсорбционных центров выбраны центральные атомы слоя (В, С, N) и атом углерода АК аланина и гистидина. Приближение АК осуществлялось вдоль прямой, обозначенной на рисунке 4 пунктирной линией.

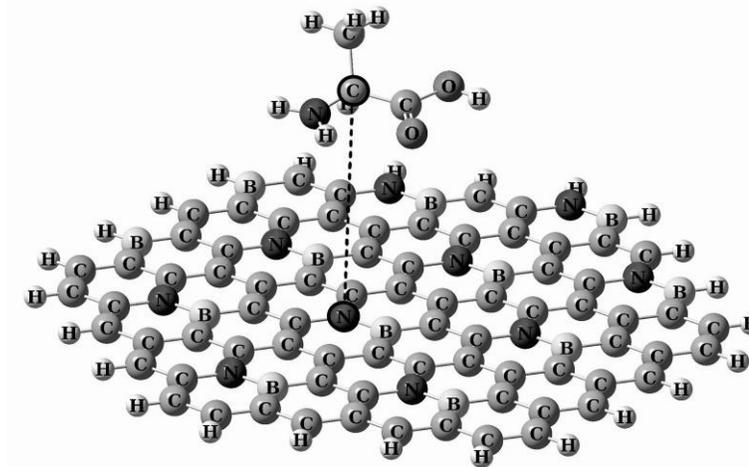


Рисунок. 5. Приближение аланина (а)

Потенциальные кривые взаимодействия АК с выбранными атомами слоя BCN качественно подобны: на графиках наблюдается четкий минимум энергии (рис 5). Результаты основных характеристик представлены в таблице 1. Для аланина лучшая адсорбция приходится на N, для гистидина – на C. Анализ зонного строения структур выявил уменьшение ширины запрещённой зоны (ΔE_g) слоя BCN с молекулой аланина на его поверхности на 2,17 мэВ, а гистидина – на 0,31 мэВ. Это изменение вызвано присутствием всего лишь одной молекулой АК на поверхности слоя, этим и обуславливается малость этого изменения. Но, мы считаем, что этого вполне достаточно для того, чтобы рассматривать его, как характерный отклик системы на присутствие АК. Полагаем, что слой BCN является перспективным материалом для одновременного использования его, как в качестве адсорбента аланина и гистидина, так и в качестве сенсора на данные АК.

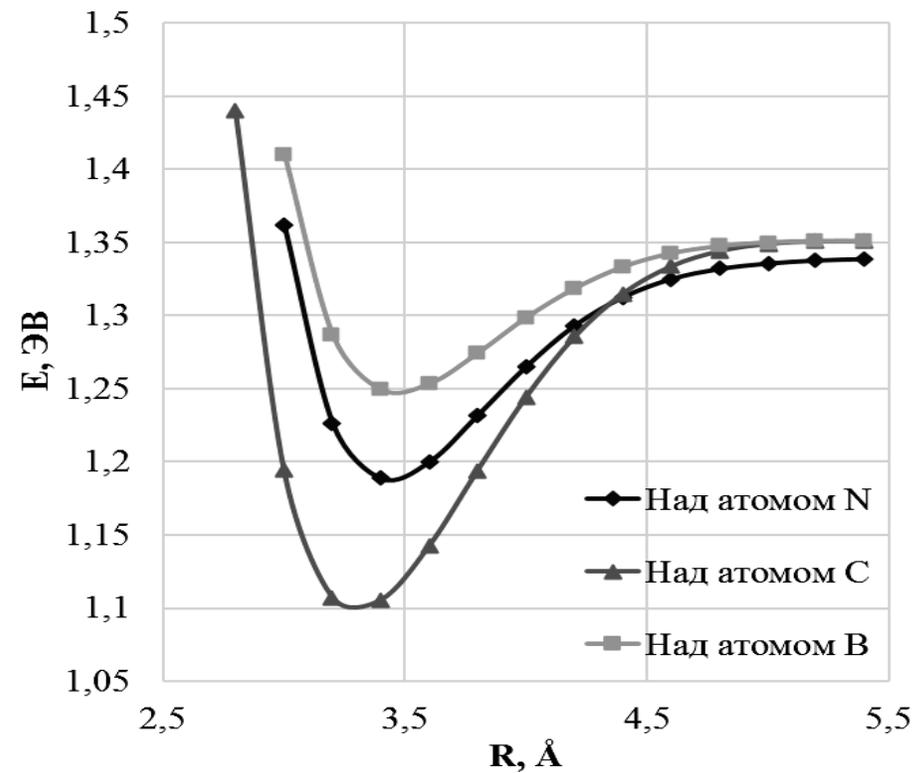
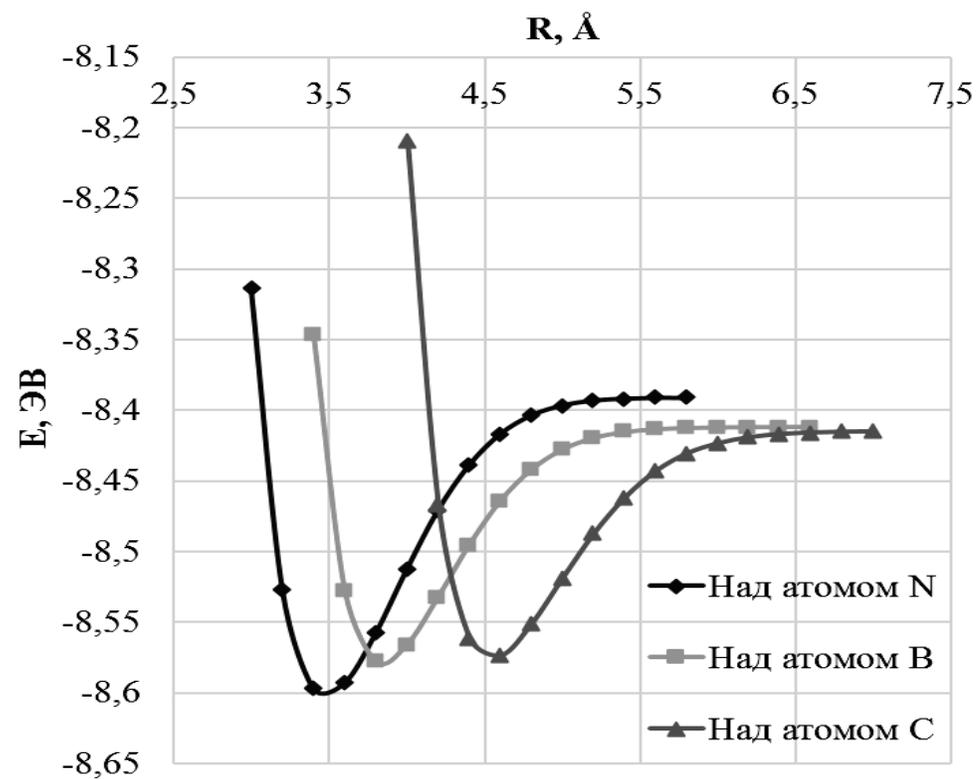


Рисунок. 6. Профили потенциальных энергий
взаимодействия аланина и гистидина с двумерным слоем

BCN

Атом ВСN, к которому приближалась аминокислота	АЛАНИН		ГИСТИДИН		ПРОЛИН	
	$R_a, \text{Å}$		$R_a, \text{Å}$		$R_a, \text{Å}$	
В	$E_a, \text{эВ}$	0,166	$E_a, \text{эВ}$	0,102	$E_a, \text{эВ}$	-
	$E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$	-0,150	$E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$	-0,148	$E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$	-0,109
	$E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$	-0,179	$E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$	-0,179	$E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$	-0,152
	$\Delta E_g, \text{эВ}$	0,029	$\Delta E_g, \text{эВ}$	0,031	$\Delta E_g, \text{эВ}$	0,044
	$R_a, \text{Å}$	3,8	$R_a, \text{Å}$	3,4	$R_a, \text{Å}$	-
С	$E_a, \text{эВ}$	0,159	$E_a, \text{эВ}$	0,246	$E_a, \text{эВ}$	-
	$E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$	-0,150	$E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$	-0,147	$E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$	-0,109
	$E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$	-0,180	$E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$	-0,178	$E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$	-0,152
	$\Delta E_g, \text{эВ}$	0,03	$\Delta E_g, \text{эВ}$	0,031	$\Delta E_g, \text{эВ}$	0,043
	$R_a, \text{Å}$	4,6	$R_a, \text{Å}$	3,4	$R_a, \text{Å}$	-
N	$E_a, \text{эВ}$	0,206	$E_a, \text{эВ}$	0,152	$E_a, \text{эВ}$	-
	$E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$	-0,150	$E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$	-0,148	$E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$	-0,109
	$E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$	-0,179	$E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$	-0,179	$E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$	-0,152
	$\Delta E_g, \text{эВ}$	0,029	$\Delta E_g, \text{эВ}$	0,031	$\Delta E_g, \text{эВ}$	0,031
	$R_a, \text{Å}$	3,4	$R_a, \text{Å}$	3,4	$R_a, \text{Å}$	-

Таблица 1. Основные характеристики рассматриваемых структур

Где, $R_a, \text{Å}$ – расстояние адсорбции, $E_a, \text{эВ}$ – энергия адсорбции, $E_{\text{НОМО}}, \text{эВ}$ – энергия верхней заполненной молекулярной орбитали, $E_{\text{ЛУМО}}, \text{эВ}$ – энергия нижней вакантной молекулярной орбитали, $\Delta E_g, \text{эВ}$ – ширина запрещенной зоны.