

АННОТАЦИЯ

К ОТЧЕТУ НИР «РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПИРИДИН-ФУРАНОВЫХ ОЛИГОМЕРОВ И ОЛИГОМЕРНЫХ СИСТЕМ МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»,

выполненных по договору № 204-24 от 15.10.2024 г.

между ООО «ЦЕНТР ПРОЕКТИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАШИН» и ФИЦ ХФ РАН.

Научный руководитель работ, гл.н.с., д.ф.-м.н. Аветисов В. А.

Научно-исследовательские работы по договору № 204-24 от 15.10.2024, являлись продолжением НИР по предыдущим договорам №202-24/15.05.2024 и №203-24/24.08.2024 между ООО «Центр проектирования молекулярных машин» и ФИЦ ХФ РАН, в рамках которых мы провели полноатомные расчеты динамических характеристик спиралеобразных пиридин-фурановых олигомеров нанометрового размера (ПФ-нанопружин), связанных листом графена, и разработали огрубленную модель MARTINI для моделирования вибрационной динамики этих нанопружин в воде на микросекундных временах. Сложность построения MARTINI-модели ПФ-нанопружин заключалась в том, что их вибрационная динамика чувствительна к тепловым флуктуациям окружающего раствора уже при комнатной температуре, и такие тонкие эффекты требовалось сохранить и в огрубленной модели. Было показано, что модель MARTINI ПФ-нанопружин воспроизводит индуцированные шумом спонтанные вибрации ПФ-нанопружин при комнатной температуре. Соответственно, Договор № 204-24 от 15.10.2024 предусматривал проведение расчетов MARTINI-модели ПФ-нанопружин еще в одном стохастически возмущенном режиме - режиме стохастического резонанса.

В части, относящейся к расчетам динамических характеристик систем ПФ-нанопружин, Договор №204-24 от 15.10.2024 предусматривал разработку атомистической модели системы 6-ти ПФ-нанопружин, связанных листом диамена, и моделирование их спонтанных вибраций в пакете GROMAX. Известно, что наличие связи определенного типа между бистабильными системами может привести к эффекту спонтанной синхронизации ее спонтанных вибраций. Вопрос в том, как такую связь реализовать конструктивно. В рамках предыдущего Договора №202-24/15.05.2024 было показано, что связывание ПФ-нанопружин листом графена приводит к частичной синхронизации их спонтанных вибраций. Представлялось интересным посмотреть, можно ли усилить синхронизацию ПФ-нанопружин связав их более жестким молекулярным слоем, например, листом диамена. Построение такой атомистической модели и проведение соответствующих расчетов и было предусмотрено Договором №204-24/15.10.2024.

Обе части научно исследовательских работ, предусмотренных Договором № 204-24 от 15.10.2024, выполнены полностью.

В части расчетов вибрационных характеристик MARTINI-модели ПФ-нанопружин в режиме стохастического резонанса показано, что MARTINI-модель ПФ-нанопружины хорошо воспроизводит эффект стохастического резонанса (см. Рис.1)ю При этом, его частотные характеристики практически совпадают с аналогичными характеристиками, полученными при полноатомных молекулярно-динамических расчетах в пакете GROMAX.

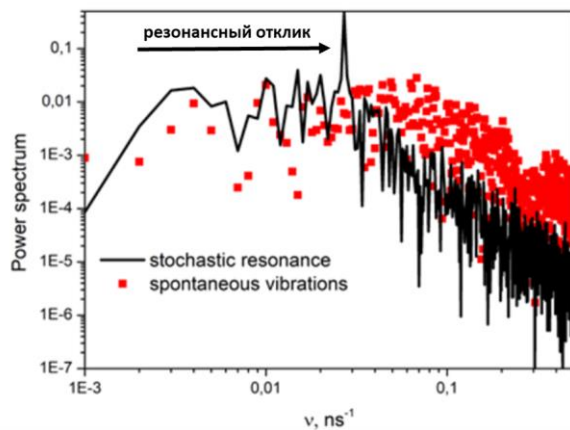
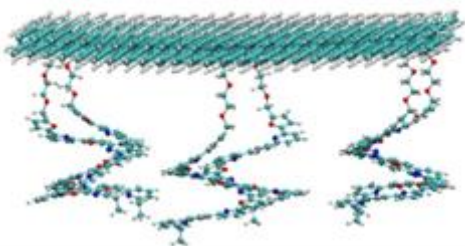
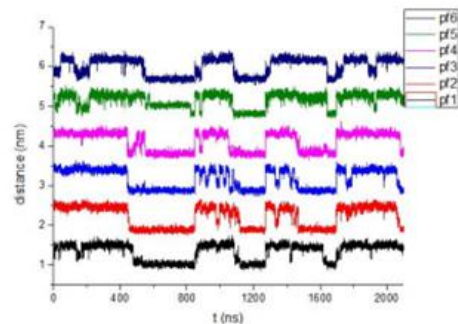


Рис. 1. Спектры мощности спонтанных вибраций (красный) и стохастического резонанса (черный) MARTINI-модели ПФ-нанопружины;

Что касается системы 6-ти ПФ-нанопружин, связанных более жестким, чем графен, листом диамена, то атомистическая модель такой системы была построена (см.рис.2а) и расчеты показали, что в такой системе индуцированные тепловым шумом спонтанные вибрации ПФ-нанопружин синхронизируются практически полностью (2б). При этом, выяснилось, что средняя частота спонтанных вибраций самих ПФ-нанопружин резко падает, выходя из мегагерцового диапазона для графена в килогерцовый диапазон для диамена.



а)



б)

Рис.2. Система 6-ти ПФ-нанопружин, связанных листом диамена: а) атомистическая модель, б) спонтанные вибрации 6-ти ПФ-нанопружин в данной системе.