

Установлено влияние нестехиометрии на структуру и диссипативные свойства (СВЧ – поглощение) керамики феррита висмута состава Bi_xFeO_3 ($0.80 \leq x \leq 1.20$).

Показаны отличия в механизмах образования примесных фаз в катиондефицитных и катионизбыточных средах.

Установлено наибольшее СВЧ – поглощение керамики с наибольшим количеством балластных соединений.

Библиографический список

1. Смоленский, Г.А. Сегнетомагнетики / Г.А.Смоленский, И.Е. Чупис // УФН. - 1982. - Т.137, №3. - С. 415-448.
2. Carvalho, T.T. Synthesis and thermodynamic stability of multiferroic BiFeO_3 / T.T. Carvalho, P.V. Tavares // Materials Letters. - 2008. - V.62. - P. 3984-3986.
3. Selbach, S.M. Structure, stability and phase transitions of multiferroic BiFeO_3 / S.M. Selbach // Thesis for degree of Philosophies Doctor. – Trondheim: 2009. – 213 p.
4. Диссипация электромагнитных волн СВЧ – диапазона в неоднородных мультиферроиках на основе BiFeO_3 / А.Г. Абубакаров, Х.А. Садыков, А.В. Павленко и др. // Изв. ВУЗов. Физика. - Т. 55. - № 9/2. - С. 253-254.

УДК. 548.12

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КОЛЬЦЕВЫХ ДИФЕНИЛАЛАНИНОВЫХ ПЕПТИДНЫХ НАНОТРУБОК НА ОСНОВЕ ГРУПП ПЕРЕСТАНОВОК

Горшков Кирилл Андреевич, доцент кафедры физики, ФГБОУ ВО РГАУ-МСХА имени К.А. Тимирязева.

Левкин Иван Вячеславович, старший преподаватель кафедры физики, ФГБОУ ВО РГАУ-МСХА имени К.А. Тимирязева.

Аннотация. В работе представлен метод описания структуры дефинилаланиновых пептидных нанотрубок, основанный на переборе многоцветных разбиений и теории групп перестановок. Полученная таблица Кэли соответствует оптимизационным моделям.

Ключевые слова: пептидные наноструктуры, таблица Кэли, группы перестановок.

Поиск материалов с сильными пьезоэлектрическими свойствами, ведущийся не только в областях нано - и микроэлектроники, но и в направлениях исследования так называемых бионакопителей (биосенсеров и биоконденсаторов) сформировал новый интерес к пептидным

наноструктурам [1,2]. Перспективы их практического использования включают создание систем структурирования объектов наномасштаба (каркасов), а также получение биологически совместимых источников энергии с высокой степенью интеграции.

С опорой на сведения, полученные авторами [3], которые проводили сопоставление различных оптимизационных моделей с результатами рентгеноструктурного анализа дифенилаланиновых пептидных нанотрубок, в данной работе была предпринята попытка описать модель пептидных наноструктур на языке математической теории представлений групп.

В работе [3] было выявлено топологическое различие между модельным представлением (структуры, представленные набором «колец») и экспериментальными данными (природный пептид в виде спиральных «катушек»). Анализ энергии связи также указывает на большую степень стабильности спиральных структур, и было бы интересно рассмотреть топологический переход «кольцо» – спиральная «катушка» (рисунок 1). С ростом увеличения уровня иерархии в спиральных структурах происходит изменение ориентации молекул в пространстве (меняется знак хиральности).

С целью описания формирования «колец» в структуре дифенилаланиновых пептидных нанотрубок воспользуемся методом перебора циклических разбиений [4,5], обладающих симметрией, применяя теорию групп перестановок.

Оказывается, перестановки, соответствующие связям молекул в «кольце», а также молекулам с одинаковой ориентацией, образуют группу, таблица Кэли которой представлена в таблице 1.

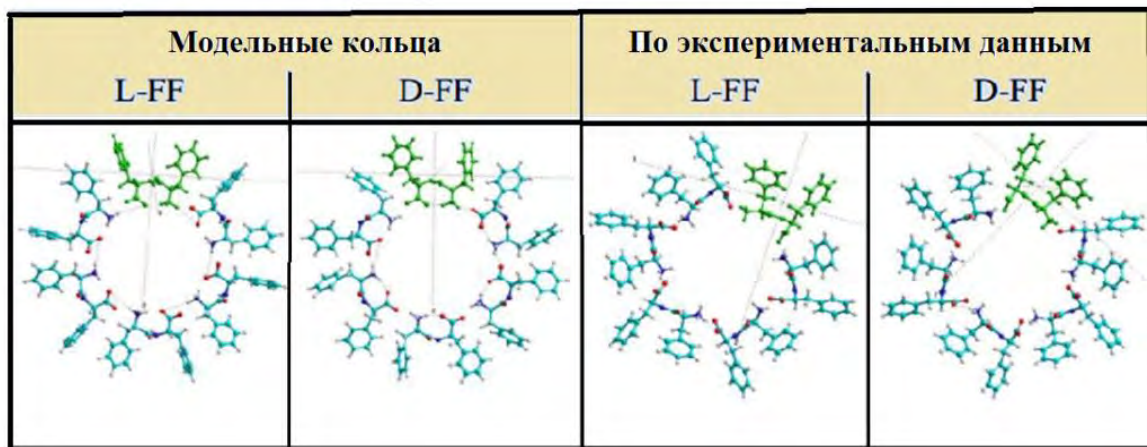


Рисунок 1 – Элементы пептидных нанотрубок в модельном представлении и по экспериментальным данным

**Циклическая точечная группа симметрии 12-го порядка для
кольца**

Перестановки	Таблица умножения						
$g[0]=(0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9\ 10\ 11)$;	$g[0]$	$g[1]$	$g[2]$	$g[3]$	$g[4]$	$g[5]$	$g[6]$
$g[7]\ g[8]\ g[9]\ g[10]\ g[11]$							
$g[1]=(1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9\ 10\ 11\ 0)$;	$g[1]$	$g[2]$	$g[3]$	$g[4]$	$g[5]$	$g[6]$	$g[7]$
$g[8]\ g[9]\ g[10]\ g[11]\ g[0]$							
$g[2]=(2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9\ 10\ 11\ 0\ 1)$;	$g[2]$	$g[3]$	$g[4]$	$g[5]$	$g[6]$	$g[7]$	$g[8]$
$g[9]\ g[10]\ g[11]\ g[0]\ g[1]$							
$g[3]=(3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9\ 10\ 11\ 0\ 1\ 2)$;	$g[3]$	$g[4]$	$g[5]$	$g[6]$	$g[7]$	$g[8]$	$g[9]$
$g[10]\ g[11]\ g[0]\ g[1]\ g[2]$							
$g[4]=(4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9\ 10\ 11\ 0\ 1\ 2\ 3)$;	$g[4]$	$g[5]$	$g[6]$	$g[7]$	$g[8]$	$g[9]$	$g[10]$
$g[11]\ g[0]\ g[1]\ g[2]\ g[3]$							
$g[5]=(5\ 6\ 7\ 8\ 9\ 10\ 11\ 0\ 1\ 2\ 3\ 4)$;	$g[5]$	$g[6]$	$g[7]$	$g[8]$	$g[9]$	$g[10]$	$g[11]$
$g[0]\ g[1]\ g[2]\ g[3]\ g[4]$							
$g[6]=(6\ 7\ 8\ 9\ 10\ 11\ 0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5)$;	$g[6]$	$g[7]$	$g[8]$	$g[9]$	$g[10]$	$g[11]$	$g[0]$
$g[1]\ g[2]\ g[3]\ g[4]\ g[5]$							
$g[7]=(7\ 8\ 9\ 10\ 11\ 0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6)$;	$g[7]$	$g[8]$	$g[9]$	$g[10]$	$g[11]$	$g[0]$	$g[1]$
$g[2]\ g[3]\ g[4]\ g[5]\ g[6]$							
$g[8]=(8\ 9\ 10\ 11\ 0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7)$;	$g[8]$	$g[9]$	$g[10]$	$g[11]$	$g[0]$	$g[1]$	$g[2]$
$g[3]\ g[4]\ g[5]\ g[6]\ g[7]$							
$g[9]=(9\ 10\ 11\ 0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8)$;	$g[9]$	$g[10]$	$g[11]$	$g[0]$	$g[1]$	$g[2]$	$g[3]$
$g[4]\ g[5]\ g[6]\ g[7]\ g[8]$							
$g[10]=(10\ 11\ 0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9)$;	$g[10]$	$g[11]$	$g[0]$	$g[1]$	$g[2]$	$g[3]$	$g[4]$
$g[5]\ g[6]\ g[7]\ g[8]\ g[9]$							
$g[11]=(11\ 0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9\ 10)$;	$g[11]$	$g[0]$	$g[1]$	$g[2]$	$g[3]$	$g[4]$	$g[5]$
$g[6]\ g[7]\ g[8]\ g[9]\ g[10]$							

В частности, двухцветный вариант разбиения, соответствующий двум выявленным в эксперименте ориентациям молекул, может быть индуцирован преобразованием $g[2] = (2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9\ 10\ 11\ 0\ 1)$, которое представляется в виде циклов $(0\ 2\ 4\ 6\ 8\ 10)$ и $(1\ 3\ 5\ 7\ 9\ 11)$.

Соответствие кристаллографической симметрии может быть отражено и в случае обозначения только шести точек (выборе одного из двух циклов), однако факт изменения и чередования ориентации молекул не был бы отражен. Именно поэтому структура кольца представлена двенадцатью точками (по числу молекул), как показано на рисунке 2.

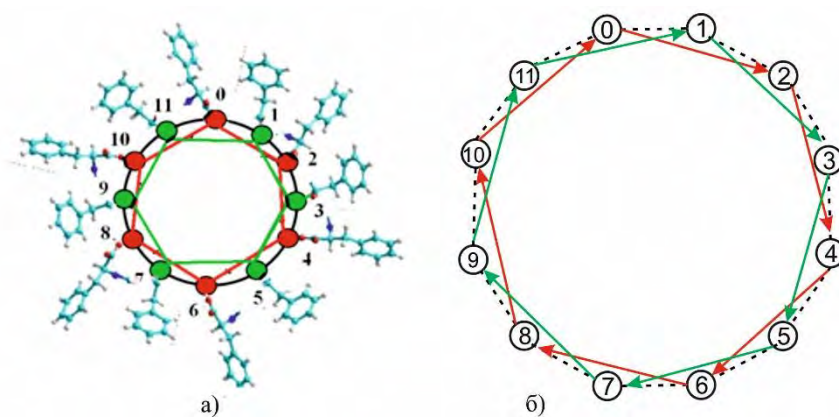


Рисунок 2 – Кольцо пептидной нанотрубки из 12 молекул– а); оргграф структуры из 12 точек, двухцветное разбиение $g[2]$ – б).

Другие варианты преобразований из таблицы Кэли соответствуют изменениям ориентации молекул в модели спиральной «катушки», если их нумеровать на каждом новом витке. Молекулы, обладающие одинаковым разворотом, будут составлять одно цветовой разбиение.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-07-00170.

Библиографический список

1. Hauser, C.A.E. Peptides as biological semiconductors / C.A.E. Hauser, S. Zhang. // Nature. -V.468. -2010. - P.516-57.
2. Piezoelectric resonators based on self-assembled diphenylalanine microtubes. / E.D.Bosne, A.Heredia, S.Kopyl et al. // Appl. Phys. Lett. - V.102. - 2013. - P.073504.
3. Chiral peculiar properties of self-organization of diphenylalanine peptide nanotubes: modeling of structure and properties / V.S. Bystrov, P.S. Zelenovskiy, A.S. Nuraeva et al. // Mathematical Biology and Bioinformatics. - V. 14, № 1-2019. - P. 94–125.
4. Cyclic partitions in nano-electronics. Nano-cluster circular systems / V.G. Rau, O. R. Nikitin, K. A. Gorshkov et al. // Moscow Workshop on Electronic and Networking Technologies (MWENT) - 2018 - P. 1-6.
5. Рау, В.Г. Нанокластерные системы колец для электроники / В.Г. Рау // Фундаментальные исследования. – 2015. – № 5-1. – С. 137-142.