

Влияние подложки из графена на стабилизацию молекулярных систем с водородными связями

© А.В. Савин^{1,2}

¹ Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

² Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва, Россия

E-mail: asavin00@gmail.com, asavin@chph.ras.ru

Поступила в Редакцию 27 апреля 2026 г.

В окончательной редакции 14 мая 2026 г.

Принята к публикации 29 мая 2026 г.

Проведено численное моделирование динамики плоских двух- и трехслойных молекулярных структур, образованных β -слоями полиглициновых пептидных цепей и системами параллельных молекул кевлара (параарамида), расположенных на листе графена. Показано, что в этих структурах β -слои сохраняют свою форму, обусловленную наличием параллельных цепочек водородных связей, вплоть до температуры $T = 800$ К. Еще более высокую устойчивость проявляет система параллельных молекул кевлара. Здесь параллельные цепочки водородных связей между пептидными группами соседних молекул сохраняются даже при более высоких температурах. Проведенное моделирование позволяет заключить, что добавление графена в волокна кевлара может существенно увеличить их термостойкость.

Ключевые слова: водородные связи, β -слои белка, слои молекул параарамида, графен.

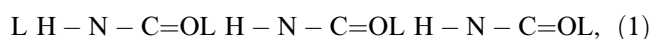
DOI: 10.61011/FTT.2026.06.63576.9561

1. Введение

Структура многих молекулярных систем характеризуется наличием в них цепочек водородных связей. К таким структурам относятся α -спирали и β -слои белка, двойные спирали ДНК, органические кристаллы ацетамидов (например, ацетанилида ($\text{CH}_3\text{CONHC}_6\text{H}_5$)_x [1,2]), кристаллы арамидов (кевлара [3]), каналы протонного транспорта в клеточных мембранах [4–7], кристаллы спиртов, галогеноводородов [8,9], а также большого количества других соединений.

Молекулярные комплексы с водородными связями характеризуются относительно небольшой энергией стабилизации (0.12–0.40 eV) в расчете на одну водородную связь, что обеспечивает их высокую динамическую подвижность. Такие системы обладают сложной многокомпонентной структурой, они состоят из нелинейно взаимодействующих между собой подсистем (электронной, экситонной, фононной, ионной, протонной). В этих системах, за счет взаимной компенсации нелинейных эффектов и дисперсии, могут образовываться устойчивые уединенные волны (солитоны, кинки, бризеры, ...). С их участием по цепочкам водородных связей может происходить высокоэффективный перенос информации, энергии, зарядов.

α -спираль белка стабилизируется тремя параллельными цепями пептидных групп HNCO (ПГ) с водородными связями:



где линиями обозначены валентные, а точками — водородные связи. Согласно теории Давыдова по этим

цепочкам может происходить транспортировка энергии, выделяемой при гидролизе молекулы аденозинтрифосфата (АТФ), в виде автолокализованных состояний колебаний амид-I двойной валентной связи $\text{C}=\text{O}$, входящих в состав ПГ. Давыдов и Кислуха еще в 1973 г. [10] (см. также [11–13]), основываясь на регулярности спиральной структуры белков, предложили модель автолокализации колебания амид-I за счет его нелинейного взаимодействия с продольными деформациями цепочек водородных связей (1). С помощью этой модели было показано, что в α -спиральных белковых молекулах могут распространяться без потери энергии и изменения формы нелинейные коллективные автолокализованные возбуждения, которые в дальнейшем получили название давыдовских солитонов [14–17]. Модель Давыдова активно используется по настоящее время — см. работы [18–22].

Наличие цепочек водородных связей (1) также допускает возможность переноса внешнего электрона в α -спиральных белках в виде электросолитона (связанного состояния локализованного электрона с областью деформации спирали, возникающей из-за взаимодействия электрона с ПГ цепочек) [23–25].

Практически все молекулярные комплексы с цепочками водородных связей перестают быть устойчивыми при высоких температурах (при $T > 100^\circ\text{C}$ все цепочки водородных связей разрушаются). Это затрудняет использование таких молекулярных систем в нанотехнологии. Помещение молекулярных систем, содержащих цепочки с водородными связями, внутрь углеродных нанотрубок приводит к их дополнительной стабилизации. Здесь цепочки водородных связей могут оставаться стабильными даже при температуре 500 К [26,27].

В настоящей работе будет показано, что использование комплексов таких молекулярных систем с листами графена тоже позволяет значительно повысить устойчивость цепочек водородных связей. С этой целью будет промоделирована динамика β -слоев белка и слоев молекул кевлара расположенных на листе графена. Работа построена следующим образом. В разд. 2 проводится моделирование β -слоев, в разд. 3 — моделирование слоев кевлара. Основные выводы и заключение приводятся в разд. 4.

2. β -слой белка

Для анализа устойчивости β -слоя рассмотрим полипептидную цепь $(\text{Gly})_N$, состоящую из N пептидных групп. Химическая формула такой цепи имеет вид



где к каждому α -атому углерода присоединены два атома водорода (для того чтобы не оставалось свободных валентностей, к первому α -атому углерода присоединены три атома водорода, а к атому азота последней пептидной группы присоединен атом водорода).

При моделировании полиглициновой цепи (2) α -атомы углерода с присоединенными к ним атомами водорода удобно считать одним объединенным атомом C_α . В этом случае каждое звено цепи будет состоять из 5 атомов C_α , C, O, N, H с координатами $\{\mathbf{u}_{n,i}\}_{i=1}^5$, где n — номер звена полипептидной цепи, а i — номер атома. Массы атомов: $M_{n,1} = 14m_p$, $M_{n,2} = 12m_p$, $M_{n,3} = 16m_p$, $M_{n,4} = 14m_p$, $M_{n,5} = m_p$ (для концевых звеньев $M_{1,1} = 15m_p$, $M_{N,4} = 15m_p$), где $m_p = 1.6603 \cdot 10^{-27}$ kg — масса протона. Для описания межатомного взаимодействия используем общее силовое поле для органических молекул AMBER (версия 2.1, апрель 2016 г.) [28]. Гамильтониан полипептидной цепи имеет вид

$$H_p = \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^5 \frac{1}{2} M_{n,i} (\dot{\mathbf{u}}_{n,i} \dot{\mathbf{u}}_{n,i}) + P(\{\mathbf{u}_{n,i}\}_{n=1,i=1}^{N,5}), \quad (3)$$

где первая сумма задает кинетическую энергию (трехмерный вектор $\mathbf{u}_{n,i}(t) = (x_{n,i}, y_{n,i}, z_{n,i})$ задает координаты i -го атома n -го звена цепи), а последнее слагаемое — потенциальную энергию цепи, найденную с использованием силового поля AMBER.

Гамильтониан листа графена имеет вид

$$H_c = \left[\frac{1}{2} M_{n,0} (\dot{\mathbf{v}}_n, \dot{\mathbf{v}}_n) + Q_n + W(z_n) \right], \quad (4)$$

где N_g — число атомов листа, $M_{n,0}$ — масса n -го атома углерода, вектор $\mathbf{v}_n(t) = (x_n, y_n, z_n)$ задает его координаты в момент времени t . Будем считать, что к краевым атомам листа присоединены атомы водорода, а группу атомов CH будем рассматривать как один объединенный атом массы $M_{n,0} = 13m_p$ (масса внутренних атомов $M_{n,0} = 12m_p$).

Слагаемое Q_n задает энергию взаимодействия n -го атома с соседними атомами листа (учитывается деформация валентных связей, валентных и торсионных углов). Детальное описание используемого силового поля дано в работах [29,30]. Потенциал

$$W(z) = \varepsilon_z [m(z_0/z)^l - l(z_0/z)^m] / (l - m), \quad (5)$$

описывает взаимодействие атомов листа с неподвижной плоской подложкой (полупространством $z \leq 0$), на которой находится лист. Здесь ε_z — энергия взаимодействия атома листа с подложкой, z_0 — равновесное расстояние атома до плоскости подложки, показатель $l > m$. Для поверхности кристалла h -BN показатели $l = 10$, $m = 3.75$ энергия $\varepsilon_z = 0.0903$ eV, расстояние $z_0 = 3.46$ Å [31,32]. Для моделирования свободного листа графена из гамильтониана (4) последний член нужно удалить.

Взаимодействие атомов полипептидной цепи с атомами листа графена опишем с помощью потенциалов Леннарда-Джонса с параметрами из силового поля AMBER.

Простейшая полипептидная цепь $(\text{Gly})_N$ кроме спиральных конформаций допускает также существование плоской структуры — β -слоя (β -листа), состоящего из системы параллельных цепочек водородных связей между пептидными группами. Такая плоская структура, неустойчивая в трехмерном пространстве, становится устойчивой, если ее расположить на плоской подложке, создаваемой листом графена.

Возьмем для определенности прямоугольный лист графена $G = \text{C}_{N_g}$ со структурой „зигзаг“ вдоль оси x и структурой „кресло“ вдоль оси y . Расположим на листе антипараллельный β -слой полипептидной цепи $(\text{Gly})_N$, в котором соседние цепочки водородных связей направлены в противоположные стороны (см. рис. 1). Антипараллельные слои более устойчивы, чем параллельные слои, в которых все водородные связи направлены в одну сторону. Такую двухслойную структуру можно обозначить формулой $(\text{Gly})_N/G|$, где вертикальная линия обозначает твердую плоскую подложку, на которой лежит лист графена G . Также рассмотрим изолированную трехслойную структуру $(\text{Gly})_N/G/(\text{Gly})_N$, в которой две одинаковые полипептидные цепи расположены на разных поверхностях одного листа.

При моделировании листа графена будем использовать условия свободных краев. Эти условия физически более обоснованы, чем часто используемые периодические граничные условия (в этом случае моделировалась бы динамика β -слоя расположенного на бесконечном листе графена) и при численном моделировании требуют меньше вычислительных ресурсов.

Для нахождения стационарного состояния двухкомпонентной системы $(\text{Gly})_N/G|$ нужно решить задачу на минимум ее потенциальной энергии

$$E \rightarrow \min : \{\mathbf{v}_n\}_{n=1}^{N_g}, \{\mathbf{u}_{n,i}\}_{n=1,i=1}^{N,5}, \quad (6)$$

Возьмем прямоугольный лист графена размера 17.5×18.58 nm, состоящий из $N_g = 12670$ атомов

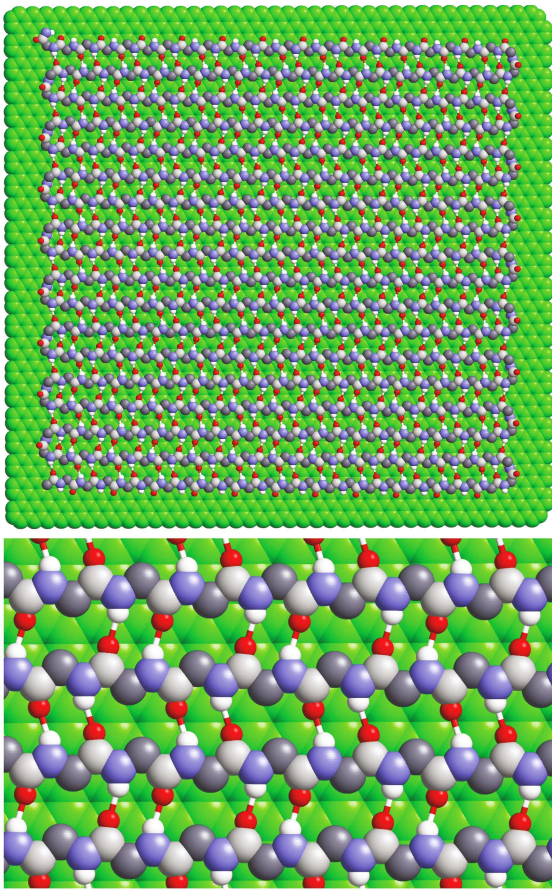


Рис. 1. Стационарное состояние антипараллельного β -слоя полипептидной цепи $(\text{Gly})_{432}$ на листе графена $G = \text{C}_{3518}$ размера $9.7 \times 9.2 \text{ nm}$ (двухслойный комплекс $(\text{Gly})_N/G$ при $N = 432$, $N_g = 3518$, число водородных связей $N_{hb} = 391$). Атомы листа графена показаны зеленым цветом, атомы углерода пептидных групп — светло-серым, α -атомы пептидной цепи — темно-серым, атомы азота — синим, кислорода — красным, водорода — белым. Водородные связи между пептидными группами показаны тонкими красно-белыми линиями. Внизу показан увеличенный центральный участок молекулярной системы.

углерода ($G = \text{C}_{12670}$), и полипептидную цепь из $N = 1584$ ПГ. Задача (6) решалась численно методом сопряженного градиента [33,34]. Решение задачи показало, что в основном стационарном состоянии полипептидная цепь лежит в плоскости, параллельной листу графена, на расстоянии $h \approx 3.33 \text{ \AA}$. В наиболее энергетически выгодной укладке β -слой имеет форму прямоугольника размера $15.9 \times 16.7 \text{ nm}$. Здесь полипептидная цепь уложена зигзагом, образуя $N_1 = 36$ параллельных линий. Эта структура стабилизируется $N_2 = 43$ поперечными цепочками водородных связей (число водородных связей $N_{hb} = N_2(N_1 - 1) = 1505$). В два раза меньшая структура с $N = 432$, $N_g = 3518$ ($N_1 = 18$, $N_2 = 23$, $N_{hb} = 391$) показана на рис. 1. Среднее значение энергии водородной связи $E_{hb} = 0.304 \text{ eV}$.

Для моделирования динамики двух- и трехслойных структур $(\text{Gly})_N/G$ и $(\text{Gly})_N/G/(\text{Gly})_N$ найдем сначала основное стационарное состояние молекулярной системы, численно решив задачу на минимум потенциальной энергии (6). Затем полученное стационарное состояние молекулярной системы поместим в термостат Ланжевена и получим его термализованное состояние. Для этого численно проинтегрируем систему уравнений Ланжевена

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{X}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{X}} - \Gamma \mathbf{M}\dot{\mathbf{X}} - \Xi, \quad (7)$$

с начальным условием, соответствующим стационарному состоянию молекулярной структуры. Здесь: H — полный гамильтониан системы; $\mathbf{X} = (\{\mathbf{v}_n\}_{n=1}^{N_g}, \{\mathbf{u}_{n,i}\}_{n=1, i=1}^{N, 5}) - 3N_a$ — мерный вектор координат атомов молекулярной структуры ($N_a = N_g + 5N$ — общее число атомов); $\mathbf{M}$ — N_a -мерный вектор масс атомов; $\Gamma = 1/t_r$ — коэффициент трения, характеризующий интенсивность обмена энергией с термостатом (время релаксации $t_r = 10 \text{ ps}$); $\Xi = \{\xi_{n,i}\}_{n=1, i=1}^{N, 3} - 3N_a$ -мерный вектор нормально распределенных случайных сил, нормализованных условиями

$$\langle \xi_{n,i}(t_1) \xi_{k,j}(t_2) \rangle = 2M_n k_B T \Gamma \delta_{nk} \delta_{ij} \delta(t_2 - t_1),$$

где T — температура термостата, k_B — постоянная Больцмана.

Система уравнений движения (7) интегрировалась численно скоростным методом Верле [35] с шагом интегрирования $\Delta t = 1 \text{ fs}$.

За время $t = 10t_r$ молекулярная система приходит в равновесие с термостатом температуры T . Дальнейшее интегрирование системы уравнений движения (7) в течение времени $t = 2 \text{ ns}$ позволяет найти среднее значение энергии системы $\bar{E}(T)$ и среднее значение числа водородных связей $\bar{N}_{hb}(T)$ (будем считать, что две пептидные группы образуют водородную связь, если энергия их взаимодействия $E > 0.18 \text{ eV}$).

Состояние молекулярной системы можно охарактеризовать ее безразмерной теплоемкостью

$$c = \frac{1}{3N_a k_B} \frac{d\bar{E}(T)}{dT} \quad (8)$$

и долей пептидных групп, участвующих в образовании водородных связей

$$p = \bar{N}_{hb}(T)/N, \quad (9)$$

$p \in [0, 1]$, при $p = 1$ каждая ПГ принимает участие в образовании двух водородных связей. Зависимость этих величин от температуры для двух- и трехслойных комплексов $(\text{Gly})_N/G$ и $(\text{Gly})_N/G/(\text{Gly})_N$ показана на рис. 2.

Численное интегрирование системы уравнений движения (7) показало, что β -слой полиглициновой цепи $(\text{Gly})_N$, расположенный на листе графена, сохраняет свою форму при температуре $T < T_0 = 825 \text{ K}$. С ростом

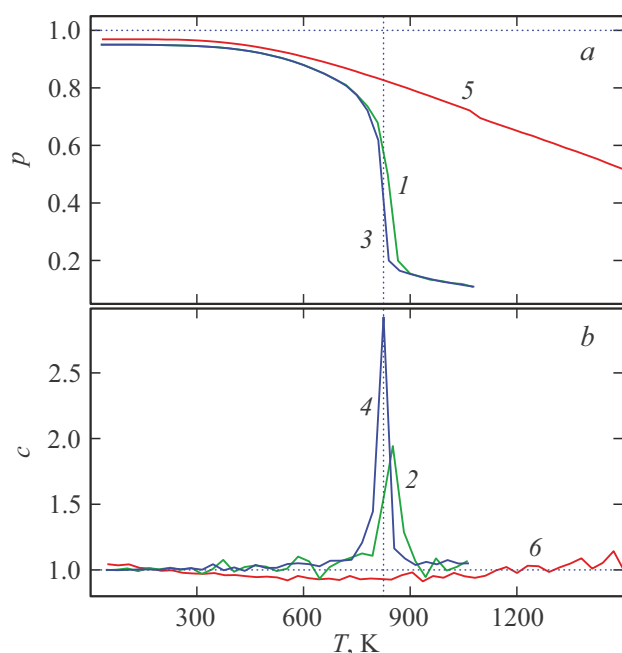


Рис. 2. Зависимость от температуры T доли пептидных групп (а), участвующих в образовании водородных связей p , и (б) безразмерной теплоемкости c для двух- и трехслойных комплексов $(\text{Gly})_N/\text{G}|$ (кривые 1, 2) и $(\text{Gly})_N/\text{G}/(\text{Gly})_N$ (кривые 3, 4), число ПГ $N = 1584$, число атомов листа графена $N_g = 12670$. Также дана зависимость для трехслойного комплекса $(\text{Aramid}_N)_{N_1}/\text{G}/(\text{Aramid}_N)_{N_1}$ (кривые 5, 6), число молекул $N_1 = 32$, число ПГ в молекуле $N = 24$. Вертикальная линия показывает значение температуры $T_0 = 825$ К, при которой происходит разрушение β -слоя.

температуры происходит только ослабление (разрыв) части водородных связей. Для стационарного состояния двухслойной структуры (при $T = 0$) доля ПГ, участвующих в образовании водородных связей, $p = 0.950$. Заметное уменьшение числа водородных связей происходит только при $T > 300$ К (см. рис. 2, а).

Ослабление связей не приводит к изменению прямоугольной формы β -слоя (см. рис. 3). При $T = 810$ К ослабленными оказываются около 30 % связей ($p = 0.679$). Дальнейшее увеличение температуры уже приводит к разрыву большинства водородных связей; при $T = 840$ К большая часть связей разрывается ($p = 0.2$), а полиглициновая цепь теряет форму плоского слоя, примыкающего к листу графена. При $T = 825$ К происходит резкий скачок безразмерной теплоемкости $c(T)$, характерный для фазового перехода первого рода (см. рис. 2, б). Здесь происходит фазовый переход полипептидной цепи из состояния „плоский β -слой“ в состояние „трехмерный клубок“ (см. рис. 4). При этой температуре происходит такой же фазовый переход и для невзаимодействующего с неподвижной подложкой трехслойного комплекса $(\text{Gly})_N/\text{G}/(\text{Gly})_N$. При температуре $810 \text{ К} \leq T \leq 840 \text{ К}$ происходит непрерывное плавление β -слоя. Из рис. 4, б видно, что плавление начинается с краев слоя. Такой сценарий типичен для

плавления длинных полимерных молекул расположенных на плоских подложках [38,39].

Таким образом, проведенное численное моделирование динамики показывает, что плоские β -слои полигли-

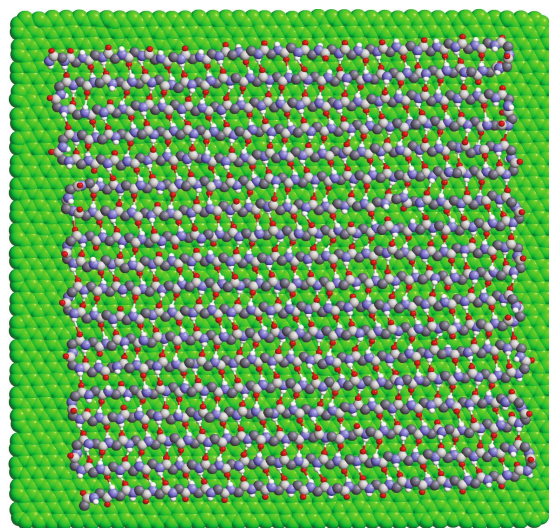


Рис. 3. Состояние β -слоя полипептидной цепи $(\text{Gly})_{432}$ на листе графена $\text{G} = \text{C}_{3518}$ (двухслойный комплекс $(\text{Gly})_N/\text{G}|$ при $N = 432$, $N_g = 3518$) при температуре $T = 600$ К. Разорваны (ослаблены) 9 % водородных связей ($\overline{N}_{hb} = 356.2$).

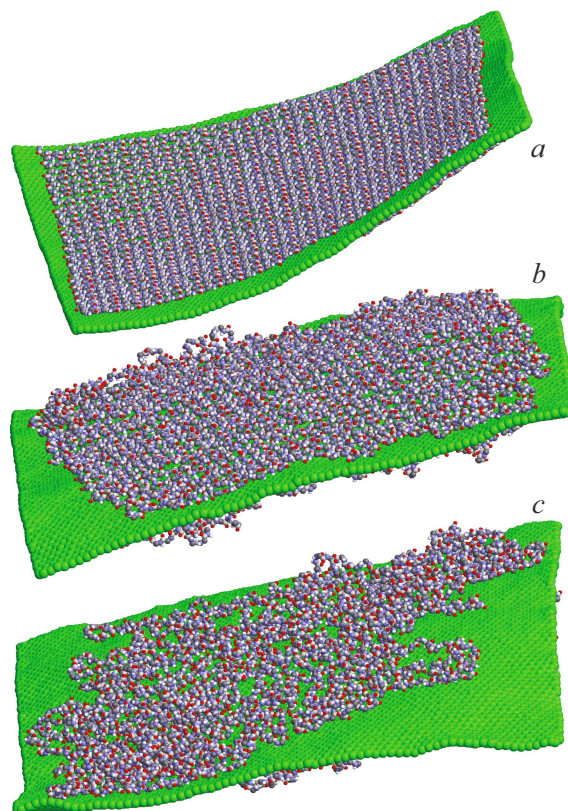


Рис. 4. Состояние изолированного трехслойного комплекса $(\text{Gly})_N/\text{G}/(\text{Gly})_N$ ($N = 1584$, $N_g = 12670$) при разной температуре T , К: а — 300, б — 810 и с — 840.

циновых цепей $(\text{Gly})_N$, расположенные на листе графена, обладают высокой устойчивостью к тепловым колебаниям. Слои сохраняют свою форму, стабилизируемую параллельными цепочками водородных связей, вплоть до $T = 800$ К. Заметим, что аминокислотный остаток Gly в белковых молекулах обычно приводит к дестабилизации α -спиралей и β -слоев из-за его высокой гибкости и отсутствия у него боковых ограничений. При расположении полиглициновой цепи на плоском листе графена эти свойства глицина, наоборот, приводят к повышенной устойчивости β -слоя. Здесь высокая гибкость такой цепи позволяет ей легко складываться в β -слои, а отсутствие крупных боковых аминокислотных остатков позволяет цепи вплотную примкнуть к поверхности листа графена. Все это приводит к эффекту „уменьшения размерности“ полиглициновой цепи, расположенной на листе графена. Здесь плавление β -слоя происходит „непрерывно“ в интервале температуры 810–840 К. Такой сценарий характерен для плавления 2D полимерных кристаллов [36–39].

3. Слой молекул кевлара

На листе графена структуры с параллельными цепочками водородных связей (1) могут также образовывать параллельные линейные молекулы кевлара (параамида — полипара-фенилентерфталамида) $\text{H}(\text{C}_6\text{H}_4\text{CONH})_N\text{C}_6\text{H}_5$ (см. рис. 5). Анализ молекулярной структуры кевлара показал, что высокий модуль упругости кевларовых волокон обусловлен высокой жесткостью ароматических полиамидных цепочек и большим количеством водородных связей в материале [40]. Согласно данным работы [3] водородные связи отвечают примерно за 60% от значения поперечной прочности волокна кевлара. Покажем, что размещение молекул кевлара на листе графена приводит к существенному увеличению устойчивости водородных связей.

Возьмем тот же лист графена $\text{G} = \text{C}_{12670}$ размера 17.56×18.58 nm. Поместим на лист систему из 32 параллельных молекул параамида $\text{H}(\text{C}_6\text{H}_4\text{CONH})_{24}\text{C}_6\text{H}_5$. Такую двухслойную структуру можно описать формулой $(\text{Aramid}_N)_N/\text{G}$, где число звеньев в одной молекуле параамида (число ПГ) $N = 24$, число молекул $N_1 = 32$, число атомов углерода листа графена $N_g = 12670$. Такая структура стабилизируется параллельными цепочками водородных связей ПГ (1). Соседние цепочки имеют противоположные направления, общее число водородных связей $N_{hb} = N(N_1 - 1) = 744$. Наличие в каждой цепи $N + 1$ плоских бензольных колец приводит к сильному взаимодействию молекулы (из-за π -стэкинга) с плоским листом графена [41]. В два раза меньшая структура с $N = 14$, $N_1 = 16$, $N_g = 3518$ ($N_{hb} = 210$) показана на рис. 5. Кроме двухслойной структуры, лежащей на плоской подложке, рассмотрим также изолированную трехслойную структуру $(\text{Aramid}_N)_{N_1}/\text{G}/(\text{Aramid}_N)_{N_1}$, когда на каждой стороне листа графена находится N_1 молекул параамида.

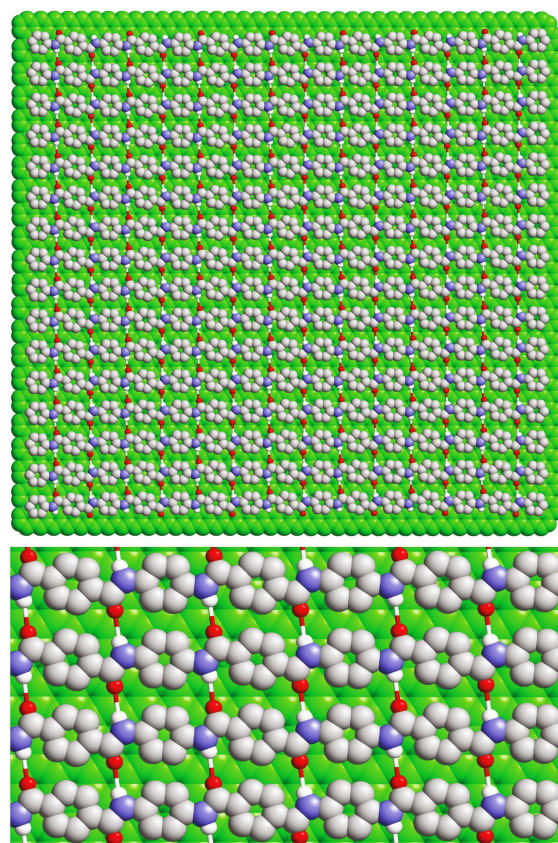


Рис. 5. Стационарное состояние системы из $N_1 = 16$ параллельных молекул параамида $\text{H}(\text{C}_6\text{H}_4\text{CONH})_{14}\text{C}_6\text{H}_5$, лежащих на листе графена $\text{G} = \text{C}_{3518}$ размера 9.7×9.2 nm (двухслойный комплекс $(\text{Aramid}_N)_{N_1}/\text{G}$ при $N = 14$, $N_1 = 16$, $N_g = 3518$, число водородных связей $N_{hb} = 210$). Атомы листа графена показаны зеленым цветом, атомы углерода молекул параамида — серым, атомы азота — синим, кислорода — красным, водорода — белым. Водородные связи между пептидными группами показаны тонкими красно-белыми линиями. Внизу показан увеличенный центральный участок молекулярной системы.

Для описания динамики молекул параамида будем использовать то же силовое поле AMBER, которое мы использовали для моделирования полиглициновой пептидной цепи. Группы атомов CH , входящие в бензольные кольца, будем учитывать как объединенные атомы с массой $M = 13m_p$. Численное решение задачи на минимум энергии взаимодействия двухслойной молекулярной системы $(\text{Aramid}_N)_{N_1}/\text{G}$ (6) показало, что в основном стационарном состоянии все молекулы параамида лежат в одной плоскости, параллельной листу графена, на расстоянии $h \approx 3.30$ Å от его поверхности. Молекулы лежат параллельно друг другу, образуя N поперечных линий водородных связей (см. рис. 5). Общее число водородных связей $N_{hb} = N(N_1 - 1) = 744$, среднее значение энергии водородной связи $E_{hb} = 0.179$ eV. Более низкое значение энергии связи по сравнению с β -слоем полиглицина связано с тем, что бензольные кольца

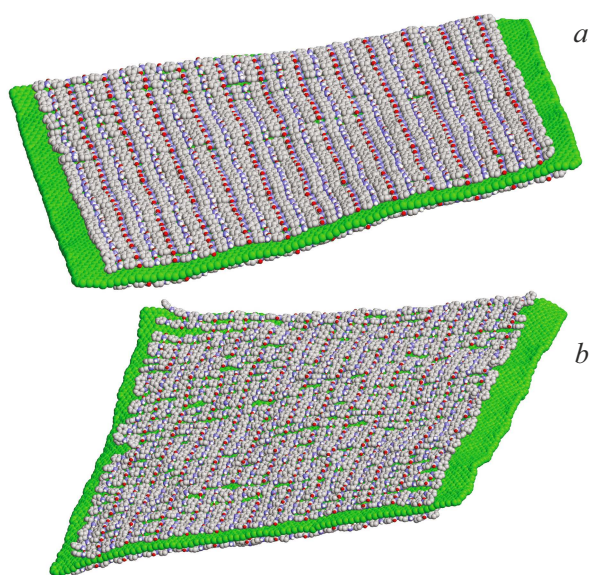


Рис. 6. Состояние изолированного трехслойного комплекса $(\text{Aramid}_N)_{N_1}/\text{G}/(\text{Aramid}_N)_{N_1}$ ($N = 24$, $N_1 = 32$, $N_g = 12670$) при разной температуре T , К: a — 600, b — 1200.

соседних молекул препятствуют сильному сближению пептидных групп, образующих водородную связь.

Для моделирования динамики двух- и трехслойных структур $(\text{Aramid}_N)_{N_1}/\text{G}|$ и $(\text{Aramid}_N)_{N_1}/\text{G}/(\text{Aramid}_N)_{N_1}$ найдем сначала основное стационарное состояние молекулярной системы, численно решив задачу на минимум ее потенциальной энергии (6). Затем полученное стационарное состояние системы поместим в термостат Ланжевена и найдем его термализованное состояние. Для этого численно проинтегрируем систему уравнений движения (7) с начальным условием, соответствующим стационарному состоянию молекулярной структуры. После получения равновесного с термостатом состояния найдем среднее значение энергии системы $\bar{E}(T)$ и среднее значение числа водородных связей $\bar{N}_{hb}(T)$ при температуре T (будем считать, что две пептидные группы образуют водородную связь, если энергия их взаимодействия $E > 0.1$ eV). Далее по формуле (8) найдем безразмерную теплоемкость системы $c(T)$, здесь полное число атомов молекулярной системы $N_a = N_1(10N + 6)$, и долю ПГ, участвующих в образовании водородных связей

$$p(T) = \bar{N}_{hb}(T)/N_{pg},$$

где общее число ПГ $N_{pg} = NN_1$.

Численное интегрирование системы уравнений движения (7) показало, что двух- и трехслойные структуры $(\text{Aramid}_N)_{N_1}/\text{G}|$ и $(\text{Aramid}_N)_{N_1}/\text{G}/(\text{Aramid}_N)_{N_1}$ устойчивы к тепловым колебаниям при всех рассмотренных температурах $T \leq 1600$ К (см. рис. 6). Безразмерная теплоемкость двух- и трехслойной структуры всегда остается равной единице ($c = 1$). С ростом температуры происходит только медленное уменьшение доли пептидных групп, участвующих в образовании водородных

связей (см. рис. 2). Здесь, в отличие от β -слоя полиглициновой цепи, разрушение плоской структуры параллельных цепочек водородных связей ПГ не происходит. Это связано с более сильным взаимодействием молекул кевлара с листом графена и, следовательно, более сильным проявлением эффекта „уменьшения размерности“ молекулярной системы при размещении ее на плоском листе графена.

Полученные результаты позволяют заключить, что добавление графена в волокна кевлара может существенно увеличить их термостойкость и устойчивость к поперечным нагрузкам.

4. Заключение

Проведенное численное моделирование динамики плоских двух- и трехслойных молекулярных структур показало, что β -слои полиглициновых пептидных цепей $(\text{Gly})_N$, расположенные на листе графена с одной или с двух сторон, обладают высокой устойчивостью к тепловым колебаниям. Слои сохраняют свою форму, обусловленную наличием параллельных цепочек водородных связей, вплоть до температуры $T = 800$ К. Высокая гибкость полиглициновой цепи позволяет ей легко складываться в β -слой, а отсутствие крупных боковых аминокислотных остатков — вплотную прижаться к поверхности листа графена. Все это вместе приводит к эффекту „уменьшения размерности“ у цепи, расположенной на листе графена.

Этот эффект еще сильнее проявляется для системы параллельных молекул кевлара (параарамиды), расположенных на поверхности листа графена, из-за сильного π -стекинг-взаимодействия ароматических колец молекул с листом. Здесь параллельные цепочки водородных связей между пептидными группами соседних молекул сохраняются даже при более высоких температурах. Проведенное моделирование таких двух- и трехслойных структур позволяет заключить, что добавление графена в волокна кевлара может существенно увеличить их термостойкость и устойчивость к поперечным нагрузкам.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 25-73-20038). Расчеты были выполнены на суперкомпьютере МСЦ НИЦ „Курчатовский институт“.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] G. Careri, U. Buontempo, F. Galluzzi, A.C. Scott, E. Gratton, E. Shyamsunder. Phys. Rev. B **30**, 8, 4689–4702 (1984). DOI: 10.1103/PhysRevB.30.4689

- [2] J.C. Eilbeck, P.S. Lomdahl, A.C. Scott. *Phys. Rev. B* **30**, 8, 4703–4712 (1984). DOI: 10.1103/PhysRevB.30.4703
- [3] S.C. Chowdhury, J.W. Gillespie Jr. *Comput. Mater. Sci.* **148**, 286–300 (2018). DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.02.055
- [4] J.F. Nagle, S. Tristram-Nagle. *J. Membrane Biol.* **74**, 1–14 (1983). DOI: 10.1007/bf01870590
- [5] K.-D. Kreuer. *Chem. Mater.* **8**, 3, 610–641 (1996). DOI: 10.1021/cm950192a
- [6] И.А. Калиман, А.А. Московский, С.С. Конюхов, А.В. Немухин. *Вестн. Моск. Ун-та, сер. 2, Химия* **49**, 5, 291–294 (2008).
- [7] C. Nagamani, U. Viswanathan, C. Versek, M.T. Tuominen, S.M. Auerbach, S. Thayumanavan. *Chem. Commun.* **47**, 6638–6640 (2011). DOI: 10.1039/C1CC11207D
- [8] R.W. Jansen, R. Bertoni, D.A. Pinnick, A.I. Katz, R.C. Hanson, O.F. Sonkey, M. O’Keeffe. *Phys. Rev. B* **35**, 18, 9830–9840 (1987). DOI: 10.1103/PhysRevB.35.9830
- [9] M. Springborg. *Phys. Rev. B* **38**, 2, 1483–1503 (1988). DOI: 10.1103/PhysRevB.38.1483
- [10] A.S. Davydov, N.I. Kislukha. *Phys. Status Solidi B* **59**, 2, 465–470 (1973). DOI: 10.1002/pssb.2220590212
- [11] A.S. Davydov, N.I. Kislukha. *Phys. Status Solidi B* **75**, 2, 735–742 (1976). DOI: 10.1002/pssb.2220750238
- [12] A.S. Davydov. *Phys. Scr.* **20**, 387–394 (1979). DOI: 10.1088/0031-8949/20/3-4/013
- [13] A.S. Davydov. *Physica D* **3**, 1–22 (1981). DOI: 10.1016/0167-2789(81)90116-0
- [14] J.M. Hyman, D.W. McLaughlin, A.C. Scott. *Physica D* **3**, 1–2, 23–44 (1981). DOI: 10.1016/0167-2789(81)90117-2
- [15] A.C. Scott. *Phys. Rev. A* **26**, 578–595 (1982). DOI: 10.1103/PhysRevA.26.578
- [16] A.C. Scott. *Philos. Trans. R. Soc. London A* **315**, 423–436 (1985). DOI: 10.1098/RSTA.1985.0049
- [17] A.C. Scott. *Phys. Rep.* **217**, 1–67 (1992). DOI: 10.1016/0370-1573(92)90093-F
- [18] D.D. Georgiev, J.F. Glazebrook. *Physica E* **124**, 114332 (2020). DOI: 10.1016/j.physe.2020.114332
- [19] D.D. Georgiev, J.F. Glazebrook. *Chaos, Solit. Fractals* **155**, 111644 (2022). DOI: 10.1016/j.chaos.2021.111644
- [20] L. Cruzeiro. *Z. Phys. Chem.* **230**, 5–7, 743–776 (2016). DOI: 10.1515/zpch-2015-0714
- [21] L. Cruzeiro. *Pure Appl. Chem.* **92**, 1, 179–191 (2020). DOI: 10.1515/pac-2019-0301
- [22] L. Cruzeiro. *Low Temp. Phys.* **48**, 973–994 (2022). DOI: 10.1063/10.0015107
- [23] А.С. Давыдов. *Теор. мат. физ.* **40**, 3, 408–421 (1979). DOI: 10.1007/BF01032070
- [24] A.S. Davydov, A.V. Zolotaryuk. *Phys. Scripta* **30**, 426–430 (1984). DOI: 10.1088/0031-8949/30/6/010
- [25] A.S. Davydov. *Solitons in Molecular Systems*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1991).
- [26] А.В. Савин, О.И. Савина. *ФТТ* **62**, 11, 1968–1974 (2020). DOI: 10.21883/FTT.2020.11.50077.076
- [27] A.V. Savin, Y.S. Kivshar. *Chaos* **34**, 043111 (2024). DOI: 10.1063/5.0197401
- [28] W.D. Cornell, P. Cieplak, C.I. Bayly, I.R. Gould, K.M. Merz, D.M. Ferguson, D.C. Spellmeyer, T. Fox, J.W. Caldwell, P.A. Kollman. *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 5179–5197 (1995). DOI: 10.1021/ja00124a002
- [29] A.V. Savin, Y.S. Kivshar, B. Hu. *Phys. Rev. B* **82**, 195422 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.82.195422
- [30] A.V. Savin and Y.S. Kivshar. *Sci. Rep.* **7**, 4668 (2017). DOI: 10.1038/s41598-017-04987-w
- [31] А.В. Савин, О.И. Савина. *ФТТ* **63**, 1, 137–145 (2021). DOI: 10.21883/FTT.2021.01.50412.183
- [32] A.V. Savin. *Phys. Rev. B* **103**, 195435 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.195435
- [33] R. Fletcher, C. Reeves. *Comput. J.* **7**, 2, 149–154 (1964). DOI: 10.1093/comjnl/7.2.149
- [34] D.F. Shanno, K.H. Phua. *ACM Trans. Math. Softw.* **2**, 1, 87–94 (1976). DOI: 10.1145/355666.355673
- [35] L. Verlet. *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967). DOI: 10.1103/PhysRev.159.98
- [36] C.L. Pint. *Phys. Rev. B* **73**, 045415 (2006). DOI: 10.1103/PhysRevB.73.045415
- [37] R. Zhang, W.S. Fall, K.W. Hall, G.A. Gehring, X. Zeng, G. Ungar. *Nat. Commun.*, **12**, 1710 (2021). DOI: 10.1038/s41467-021-21799-9
- [38] H. Yang, Z.-S. Li, Z.-Y. Lu, C.-C. Sun. *Surf. Sci.* **600**, 6, 1213–1220 (2006). DOI: 10.1016/j.susc.2006.01.023
- [39] C. Wexler, L. Firlej, B. Kuchta, and M.W. Roth. *Langmuir* **25**, 12, 6596–6598 (2009). DOI: 10.1021/la900808f
- [40] B. Wang, Z. Mao, D. Li, K. Zhang, C. Zhou, M. Ren, T. Li. *Comput. Mater. Sci.* **185**, 109957 (2020). DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109957
- [41] J. Lian, J. Fan, Z. Shi, H. Li, J. Yin. *Polymer* **55**, 10, 2578–2587 (2014). DOI: 10.1016/j.polymer.2014.03.059

Редактор А.Н. Смирнов