



Shaxrizoda MATNAZAROVA,

O'zbekiston Milliy universiteti, Fizika fakulteti magistrantanti

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti muhandisi

E-mail: shahrizodamatnazarova300@gmail.com

Turg'unali AXMADJANOV,

O'zbekiston Milliy universiteti, Fizika fakulteti Fotonika kafedrtasi mudiri

E-mail: t.akhmadjanov@nuu.uz

Umedjon XALILOV,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti bosh ilmiy xodimi

E-mail: umedjon.khalilov@uantwerpen.be

Maksudbek YUSUPOV,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti bosh ilmiy xodimi

E-mail: maksudbek.yusupov@uantwerpen.be

Geologiya fanlari universiteti, Aniq va tabiiy fanlar kafedrasida dotsenti, f.-m.f.d. X.Raximov taqrizi ostida

BEHAVIOUR OF CARBON NANOTUBES IN WATER ENVIRONMENT

Abstract

Due to the cytotoxicity of carbon nanotubes (CNTs), there is an increasing need for functionalized CNTs (fCNTs) nowadays. Although a number of studies have been conducted to investigate the cytotoxic effects of fCNTs, their behavior in an aqueous medium has not been sufficiently studied. In this research, the atomic level mechanisms of interaction between pristine (non-functionalized) and fCNTs and water molecules were studied by computer simulations. The computational results showed that an increase in the number of functional groups in fCNT leads to an increase in its interaction energy with the water environment due to hydrogen bonds. This, in turn, results in a decrease in the cytotoxicity of fCNT. Overall, the results of the study contribute to the understanding at the molecular level of the transport and delivery of biological drugs using CNTs in the field of biomedicine.

Keywords: single wall carbon nanotubes, functionalized single wall carbon nanotubes, binding energy, water environment, interaction energy, molecular dynamics.

ПОВЕДЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Аннотация

Из-за цитотоксичности углеродных нанотрубок (УНТ) в настоящее время возрастает потребность в функционализированных УНТ (фУНТ). Хотя для изучения цитотоксических эффектов фУНТ проведен ряд исследований, их поведение в водной среде изучено недостаточно. В этом исследовании с помощью компьютерного моделирования исследованы механизмы взаимодействия чистых (нефункционализированных) и фУНТ с молекулами воды на атомном уровне. Результаты моделирования показали, что увеличение количества функциональных групп фУНТ приводит к увеличению энергии ее взаимодействия с водной средой за счет водородных связей. Это, в свою очередь, приводит к снижению цитотоксичности фУНТ. В целом результаты исследования способствуют пониманию на молекулярном уровне транспорта и доставки биологических препаратов с использованием УНТ в области биомедицины.

Ключевые слова: одностенные углеродные нанотрубки, функционализированные одностенные углеродные нанотрубки, энергия связи, водная среда, энергия взаимодействия, молекулярная динамика.

UGLEROD NANONAYCHASINING SUV MUHITIDAGI TABIATI

Annotatsiya

Uglerod nanonaychasi (UNN)ning sitotoksik ta'sirga ega ekanligi bugungi kunda funkcionallashgan UNN (fUNN)ga bo'lgan talabni tobora orttirmoqda. Garchi fUNNlarning sitotoksik effekti bo'yicha bir qator tadqiqotlar amalga oshirilgan bo'lsada, ularning suv muhitidagi tabiati yetarlicha tadqiq etilmagan. Ushbu tadqiqot ishida toza (funkcionallashmagan) hamda fUNN bilan suv molekullari orasidagi o'zaro ta'sirning atomar darajadagi mexanizmlari kompyuterda modellastirish orqali o'rganildi. Modellastirish natijalari fUNNdagi funktsional guruhlarning sonining ortishi uning suv muhiti bilan o'zaro ta'siri vodorod bog'lari tufayli kuchayishiga olib kelishini ko'rsatdi. Bu esa, o'z navbatida, fUNNning sitotoksikligi kamayishiga sabab bo'ladi. Umuman olganda, bu tadqiqot natijalari biomeditsina sohasida UNN yordamida biologik dori vositalarini tashish va yetkazish jarayonlari molekulyar darajada tushunishga yordam beradi.

Kalit so'zlar: bir qavatli uglerod nanonaychasi, funkcionallashgan bir qavatli uglerod nanonaychasi, bog'lanish energiyasi, suv muhiti, o'zaro ta'sir energiyasi, molekulyar dinamika

Kirish. Uglerod nanostrukturalari o'zining noyob fizik, kimyoviy va biologik xususiyatlari tufayli istiqbolli materiallar sifatida turli sohalarda keng miqyosda qo'llanilmoqda [1]. Ayniqsa, ular orasida uglerod nanonaychasi (UNN) o'zining mukammal elektr va mexanik xususiyatlari tufayli ko'pgina sohalarga jadallik bilan kirib kela boshladi [2]. Xususan, ular biomeditsina sohasida biologik dori vositalarini tashish va yetkazishda hamda biosensorlar sifatida qo'llanila boshlandi [3-7]. UNNlar hujayralarda membrana kanali sifatida qo'llanilib, ular hujayra membranasi orqali DNK va boshqa dori vositalarini tashishda ajoyib transport xususiyatlarini namoyish etishgan [8-11]. Ayniqsa, saraton kasalligini davolashda UNNlar istiqbolli tashuvchilar sifatida qaralib [12], ular terapiya natijasida yuzaga keladigan nojo'ya ta'sirlarni, ya'ni dori vositalarining

toksikligini kamaytirishda [12-15] va o'simta joylashgan sohaga dorilarni ko'proq yetkazib berishda foydalanilmoqda [16]. Bu esa, o'z navbatida, bemordagi sog'lom to'qimalarning kamroq shikastlanishiga yordam beradi.

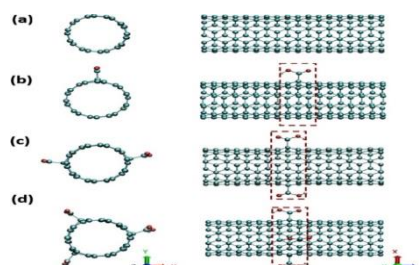
Toza yoki funksionallashtirilmagan UNNlar gidrofob bo'lib, suvda erimasligi [17, 18] tufayli ular suvli eritmalarida to'planish xususiyatiga ega [19]. To'plangan UNNlar yuzasining gidrofobikligi ularning hujayralar o'sishida zarur bo'lgan ozuqa moddalarni (nutrientlarni) o'ziga xos tarzda kimyoviy bog'lab olishiga va natijada hujayralarga bilvosita sitotoksik ta'sir ko'rsatishiga (ya'ni, hujayralarning shikastlanishi va nobud bo'lishiga) olib keladi [20]. Xususan, sinov hayvonlari bilan o'tkazilgan tajribalarda ularning o'pkalarida toza UNNlar tufayli zaharlanish holatlari oshganligi kuzatilgan [21, 22]. Bu esa biotibbiyotda toza UNNlardan amaliy foydalanishni cheklaydi va ularning suvli muhitda eruvchanligini (biomoslashuvchanligini) oshirish orqali toksikligini kamaytirish zaruriyatini tug'diradi.

UNNlar toksikligini kamaytirishning samarali usuli bu biomoslashuvchan organik materiallarni toza UNN sirtiga qo'shish, ya'ni unga suvda eruvchan funksional radikallarni birlashtirish hisoblanadi. Bu borada chumoli kislotasi radikali ($-\text{CO}_2\text{H}$) bilan funksionallashtirilmagan (ya'ni, karboksillangan) UNNlar yordamida o'tkazilgan tajribalar ushbu UNNlarning sitotoksik ta'siri mavjud emasligini ko'rsatdi [23]. Bundan tashqari, ko'pgina tadqiqotlarda nanonaychalarni funksionallashtirish orqali modifikatsiya qilingandan so'ng ularning eruvchanligi sezilarli darajada oshishi aniqlangan [24-30]. Xususan, kvant-mexanik hisoblashlar karboksillangan bir qavatli UNN (BQNN) sirtidagi funksional guruhlar sonining ortishi BQNN solvatatsiya Gibbs erkin energiyasi va dipol momentining ortishiga olib kelishini ko'rsatgan [28]. Bu esa o'z navbatida BQNNning suvda eruvchanligi sezilarli darajada ortganligidan dalolat bergan [28]. Molekulyar dinamika (MD) usuli yordamida amalga oshirilgan modellashtirish tadqiqotida esa karboksillangan BQNNning suvdagi diffuziya koeffitsienti toza BQNNnikiga qaraganda kamroq bo'lishi aniqlangan va bu BQNNning gidrofilik xususiyati oshganligiga dalolat qilgan [31]. Shuni ta'kidlash joizki, yuqorida keltirilgan tadqiqotlarda model tizimlar sifatida chekli uzunlikdagi ($\leq 11 \text{ \AA}$) va chetlari vodorod atomlari bilan to'yingan BQNNlar tanlangan, ya'ni ularning fizik-kimyoviy xususiyatlari eksperimental usullar bilan olingan yetarlicha uzun BQNNlarnikidan farq qiladi. Undan tashqari, ushbu tadqiqotlarda funksionallashtirilmagan BQNN (fBQNN)ning diffuziyasi bilan bog'liq molekulyar darajadagi tafsilotlar yetarlicha chuqur o'rganilmagan.

Yuqoridagi mulohazalardan kelib chiqib, ushbu tadqiqotda toza hamda chumoli kislotasi radikallari bilan turli darajada funksionallashtirilmagan (karboksillangan) BQNNning suv muhiti bilan o'zaro ta'sirining atomar darajadagi mexanizmlari reaktiv MD usuli yordamida kompyuterda modellashtirish orqali o'rganiladi.

Modellashtirish tafsilotlari. Toza va fBQNNning suv muhitidagi tabiatini yaxshiroq tushunish, ya'ni BQNNning suv bilan o'zaro ta'sir mexanizmlarini atomar darajada tadqiq qilish uchun ReaxFF potentsialidan (yoki kuch maydonidan) [32] foydalangan holda reaktiv MD simulyatsiyalari amalga oshirildi. ReaxFF yordamida turli xil model tizimlar, jumladan, suv [33], UNN [34] va boshqa bir qancha strukturalarda MD simulyatsiya ishlari amalga oshirildi. Ushbu tadqiqot ishida ReaxFF kuch maydonining Zou va boshqalar [35] tomonidan ishlab chiqilgan parametrlar to'plamidan foydalanildi. Bu parametrlar to'plami UNNni juda yaxshi (ya'ni, aniq va ishonchli) tasvirlay olishi Xalilov va boshqalar tomonidan ko'rsatilgan [34]. Uni suv muhitini ham yaxshi tasvirlay olishi ushbu ishda qo'shimcha MD simulyatsiyasini bajarish orqali tekshirib olindi.

BQNNning suv muhitidagi tabiatini o'rganish uchun (5,5) xiralikli, $22 \text{ \AA}$ uzunlikka ega bo'lgan va $6.8 \text{ \AA}$ diametrligi toza BQNN model tizimi *Nanotube Modeler* dasturi yordamida hosil qilindi (1(a)-rasm). fBQNN model tizimlarini hosil qilish uchun esa ushbu toza BQNN sirtiga bitta, ikkita va uchta chumoli kislotasi radikali ($-\text{CO}_2\text{H}$) kovalent bog'langan holatda tayyorlandi (1(b-d)-rasm). Ushbu funksional guruhlar z-o'qi yo'nalishi bo'yicha BQNNning o'rta sohalariga bog'landi. So'ngra, ushbu 4 ta model tizimlar atrofi suv molekullari bilan qoplandi. Shunday qilib, toza va fBQNN atrofidagi suv molekullari bilan birgalikda $22 \times 22 \times 22.68 \text{ \AA}^3$ o'lchamdagi simulyatsiya qutisiga joylashtirildi. Simulyatsiya qutisining uchchala yo'nalishi bo'ylab davriy chegaraviy shartlar qo'llanildi: bu BQNNlarni xuddi eksperimental tadqiqotlardagi kabi yetarlicha uzun deb hisoblashga imkon beradi.



1-rasm. (5,5) xiralikli toza (a) hamda bitta (b), ikkita (c) va uchta (d) chumoli kislotasi radikali ($-\text{CO}_2\text{H}$) bilan funksionallashtirilmagan BQNNlarning tepadan (chapda) va yon tomondan (o'ngda) ko'rinishi. Qizil punktirli to'rtburchaklar BQNNdagi funksional guruhlar joylashgan sohalarini ko'rsatadi.

Dastlab, model tizimlar energiyasi birlashtirilmagan gradient usuli yordamida minimallashtirildi. So'ngra, tizimlarning harorati 310 K gacha NpT ansambli yordamida 1 atm bosim ostida 1 K/ps tezlik bilan 310 ps vaqt davomida sekin-asta qizdirildi. Bunda Berendsen termostati va barostatidan foydalanib, ularning ulanish davriyligi, mos ravishda, 0.1 va 5 ps qilib olindi [36]. Harorati 310 K ga yetgan model tizimlar yana 1 ns vaqt davomida NpT ansambli yordamida Berendsen termostati va barostati yordamida termalizatsiya qilindi. Barcha MD modellashtirishlarda vaqt qadami etib 0.25 fs tanlandi.

Natijalar va ularning muhokamasi

Funksional guruhning ($-\text{CO}_2\text{H}$) BQNN bilan o'zaro ta'siri

Gidrofilik funksional guruhlarning nanonaycha bilan o'zaro ta'sirini baholash uchun ushbu guruhlarning BQNN sirtiga bog'lanish energiyasi E_b quyidagicha aniqlandi:

$$E_b = E_{BQNN-(\text{CO}_2\text{H})_n} - (E_{BQNN} + E_{(\text{CO}_2\text{H})_n}) \quad (1)$$

bu yerda, n – funksional guruhlar soni ($n=1-3$), $E_{BQNN-(CO_2H)_n}$ – BQNN va funksional guruh(lar)dan tashkil topgan tizimning, E_{BQNN} va $E_{(CO_2H)_n}$ lar esa BQNN va funksional guruh(lar)ning alohida holatdagi potensial energiyalari (eV). Ushbu (1) formuladan foydalanib, $-CO_2H$ radikal(lar)ning (funksional guruh(lar)ning) BQNN sirtiga bog'lanish energiyasi vakuum va suvli muhit uchun hisoblandi (1-jadval).

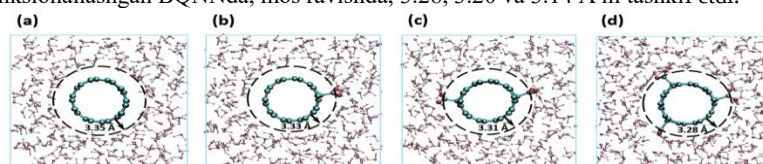
1-jadval. Vakuum va suv muhitidagi BQNN sirtiga $-CO_2H$ radikal(lar)ning bog'lanish energiyasi. Qavs ichida berilgan qiymatlar bitta $-CO_2H$ radikaliga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi hisoblanadi.

-CO ₂ H radikal soni	Bog'lanish energiyasi (eV)	
	vakuumda	suvda
1	-4.56	-4.58
2	-9.12 (-4.56)	-9.16 (-4.58)
3	-13.62 (-4.54)	-13.74 (-4.58)

Jadvaldan ko'rinadiki, ikkala holatda ham (ya'ni, vakuum va suv muhiti holatlarida) bitta radikalga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi radikal sonining ortishi bilan deyarli o'zgarmaydi. Chunonchi, vakuum muhitida bitta radikalga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi 1, 2 va 3 ta funksional guruhli BQNNlar uchun, mos ravishda, -4.56, -4.56 va -4.54 eV ga teng bo'lsa, suvli muhitda uning qiymati barcha holatlar uchun -4.58 eV ni tashkil etadi. Shuni ta'kidlash joizki, oldingi kvant-mexanik hisoblash natijalari BQNN sirtidagi radikal sonining ortishi ularning BQNNga bog'lanish energiyasining kamayishiga (ya'ni, bog'ning zaiflashishiga) olib kelishini ko'rsatgan [28]. Ushbu ishdagi natijalarning kvant-mexanik natijalardan farq qilishini tadqiqotlarda qo'llanilgan BQNN o'lchami va uning chetlari vodorodlanganligi orqali tushuntirish mumkin. Boshqacha qilib aytganda, kvant-mexanik tadqiqotlarda uzunligi 8.65 Å va cheklangan BQNN model strukturalari tanlangan bo'lib, uning chetlaridagi uzilgan bog'lar vodorod atomlari bilan to'yingan (bog'langan). Ushbu vodorod atomlari BQNNdagi funksional guruhlar bilan bog'lanmagan (ya'ni, Van der Waals va Kulon) kuchlar orqali o'zaro ta'sirlashishi ushbu guruhlarining BQNN bilan bog'lanish energiyasiga ta'sir qilishi mumkin. Bizning tadqiqotimizda BQNN strukturasida vodorod atomlarining mavjud emasligi ularning funksional guruhlar bilan o'zaro ta'sirlashish imkonini yo'qqa chiqaradi va shuning uchun bog'lanish energiyasi o'zgarmaydi (1-jadvalga qarang). Undan tashqari, BQNNning yetarlicha uzun (~22 Å) ekanligi uning chetlarida vodorod atomlari mavjud bo'lgan taqdirda ham ularning funksional guruhlar bilan o'zaro ta'sirlashmasligiga sabab bo'ladi (ya'ni, vodorod atomlari va funksional guruhlar bir-biri bilan ta'sirlashish doirasidan tashqarida joylashgan). Haqiqatan, yetarlicha uzun (~22 Å) BQNNning chetlari vodorodlangan strukturalari bilan o'tkazgan sinov modelashtirishlarimiz yuqoridagi fikrimizni to'liq tasdiqladi. Xususan, vakuum muhitida bitta radikalga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi 1, 2 va 3 ta funksional guruhli vodorodlangan BQNNlar uchun, mos ravishda, -4.61, -4.62 va -4.59 eV ga teng ekanligi (ya'ni, deyarli bir xilligi) aniqlandi.

Toza va fBQNNning suv muhiti bilan o'zaro ta'siri

2-rasmda suv muhitiga joylashtirilgan toza BQNN hamda bitta, ikkita va uchta gidrofil $-CO_2H$ radikalli fBQNNlar sirti bilan ularga eng yaqin bo'lgan suv molekularining O atomlari orasidagi o'rtacha masofa keltirilgan. Olingan natijalar ushbu o'rtacha masofalarning adabiyotlardagi toza BQNN uchun DFT usuli yordamida hisoblangan masofa (ya'ni 3.2 Å [37]) ga yaqin ekanligini ko'rsatdi. Shunga e'tibor berish kerakki, DFT usuli yordamida toza BQNN atrofiga joylashtirilgan bitta suv molekulasining O atomi bilan unga eng yaqin bo'lgan BQNNdagi C atomi orasidagi masofa hisoblangan. 2-rasmdan ko'rinadiki, BQNN sirtidagi funksional guruhlar sonining ortishi bilan BQNN va suv molekulari orasidagi o'rtacha masofa kamayadi. Xususan, toza, bitta, ikkita va uchta radikalli BQNNlar uchun bu masofalar, mos ravishda, 3.35, 3.33, 3.31 va 3.28 Å ni tashkil etadi. Boshqacha qilib aytganda, bitta, ikkita hamda uchta radikal bilan funkcionallashgan BQNNdagi o'rtacha masofa toza BQNNdagiga qaraganda, mos ravishda, 0.02, 0.04 Å va 0.07 Å ga kamayadi (2-rasm). Bundan tashqari, tadqiqot natijalari BQNNning funksional radikal joylashgan sohasida (1-rasmdagi qizil punktirli to'rtburchaklarga qarang) ushbu masofalar nanonaychani qolgan sohalariga qaraganda yanada qisqaroq bo'lishini ko'rsatdi. Xususan, ushbu masofalar bitta, ikkita va uchta radikal bilan funkcionallashgan BQNNda, mos ravishda, 3.28, 3.20 va 3.14 Å ni tashkil etdi.



2-rasm. Toza (a), bitta (b), ikkita (c) va uchta (d) $-CO_2H$ radikallari bilan funkcionallashgan BQNNlarning suv muhitidagi ko'rinishi. Punktirli aylanalarda BQNN C atomlari bilan ularga eng yaqin suv molekularining O atomlari orasidagi o'rtacha masofani ko'rsatadi. BQNNdagi C atomlar hamda suvdagi O va H atomlar, mos ravishda, zangori, qizil va oq ranglarda tasvirlangan.

Umuman olganda, ushbu masofalarning kamayishini BQNNning gidrofil funksional guruhlar bilan suv molekulari orasida hosil bo'lgan vodorod bog'lari orqali tushuntirish mumkin. Haqiqatan, funksional radikal sonining ortishi bilan vodorod bog'larining soni ortib boradi. Bu esa, o'z navbatida suv molekularining nanonaycha sirtiga yanada ko'proq tortilishi tufayli unga yaqin masofaga joylashishiga sabab bo'ladi.

Vodorod bog'lari sonining ortishi bilan fBQNNga suv molekularining ko'proq tortilishini ular orasidagi o'zaro ta'sir energiyasini hisoblash orqali baholash mumkin. 2-jadvalda toza va fBQNNlarning suv molekulari bilan o'zaro ta'sir energiyalari keltirilgan. Shuni ta'kidlash kerakki, ushbu energiyalar (1) formulada keltirilgan bog'lanish energiyasiga o'xshash hisoblanadi. Boshqacha qilib aytganda, fBQNN va suv orasidagi o'zaro ta'sir energiyasi suvli sistemaning (fBQNN+suv) potensial energiyasidan fBQNN va suv muhitining alohida hisoblangan potensial energiyalari yig'indisini ayirish orqali aniqlanadi.

2-jadval. Toza hamda funkcionallashgan nanonaychalarning suv molekulari bilan o'zaro ta'sir energiyalari.

Nanonaycha	Nanonaychani suv bilan	Nanonaychadagi atomlar	Nanonaycha bitta atomiga to'g'ri
------------	------------------------	------------------------	----------------------------------

	o'zaro ta'sir energiyasi (eV)	soni	keluvchi energiya (eV)
BQNN	-6.13	180	-3.41×10^{-2}
BQNN-CO ₂ H	-6.46	184	-3.51×10^{-2}
BQNN-(CO ₂ H) ₂	-7.44	188	-3.96×10^{-2}
BQNN-(CO ₂ H) ₃	-8.72	192	-4.54×10^{-2}

Jadvaldan ko'rinadiki, toza BQNN bilan suv molekularlari orasidagi o'zaro ta'sir energiyasi -6.13 eV ga teng va bu energiya BQNNdagi funksional guruhlar sonining ortishi bilan ortib boradi. Xususan, 1, 2 va 3 ta radikalli BQNNlar uchun ushbu energiya, mos ravishda, -6.46 eV, -7.44 eV va -8.72 eV ga teng. Jadvaldan yana ko'rish mumkinki, ushbu o'zaro ta'sir energiyalarining BQNNdagi bitta atomga to'g'ri keluvchi o'rtacha qiymatlari ham BQNNdagi funksional radikallar sonining ortishi bilan ortib boradi, ya'ni, toza, 1, 2 va 3 ta radikalli BQNNlar uchun ularning qiymati, mos ravishda, -3.41×10^{-2} , -3.51×10^{-2} , -3.96×10^{-2} va -4.54×10^{-2} ga teng. O'zaro ta'sir energiyasining ortishi tufayli suv molekularlarining nanonaycha sirtiga ko'proq tortilishi fBQNNning suvdagi harakatiga to'sqinlik qilib, uning diffuziya koeffitsientini kamayishiga olib kelishi mumkin. Demak, ushbu natijalar fBQNNning suvdagi diffuziyasi bo'yicha olingan oldingi MD natijalari [31] bilan to'la mos keladi va fBQNNning suv muhitidagi tabiatini tushunishimizda yordam beradi.

Xulosalar. Ushbu MD tadqiqot ishida toza va fBQNNning suv muhiti bilan o'zaro ta'siri mexanizmlari atomar darajada tadqiq etildi. Olingan natijalar vakuum va suv muhitidagi BQNNda bitta funksional guruhga to'g'ri keluvchi bog'lanish energiyasi funksional guruhlar sonining ortishi bilan deyarli o'zgarishsizligini ko'rsatdi. Bu esa BQNNning yetarlicha uzun qilib tanlanganligi va chetlarida vodorod atomlari mavjud bo'lmashligi orqali tushuntirildi. Simulyatsiya natijalari yana shuni ko'rsatdiki, funksional guruhlar sonining ortishi ular bilan suv molekularlari orasidagi o'zaro ta'sir energiyasining vodorod bog'lari tufayli ortishiga olib keladi. fBQNN bilan suv molekularlari orasidagi o'zaro ta'sirning kuchayishi, o'z navbatida, fBQNN eruvchanligining oshishiga, bu esa uning sitotoksikligi kamayishiga olib keladi.

Tashakkurnoma. Ushbu tadqiqot ishi O'zbekiston Respublikasi Innovatsion rivojlanish vazirligi tomonidan moliyalashtirilgan F-FA-2021-512 fundamental loyiha doirasida amalga oshirildi. Modellashtirish ishlari O'zR FA Ion-plazma va lazer texnologiyalari institutidagi NanoSim guruhi tomonidan tashkil etilgan FISTUZ superkompyuterlar klasteri yordamida bajarildi.

ADABIYOTLAR

1. N.S. Kasáková et al., *Carbon nanostructures, nanolayers, and their composites*, J. Nanomater. 11, 2021, 9, 2368.
2. G. Rahman et al., *An Overview Of The Recent Progress In The Synthesis And Applications Of Carbon Nanotubes*, C–Journal of Carbon Research 5, 2019, 1, 3.
3. X. Liu et al., *Understanding the interaction of single-walled carbon nanotube (SWCNT) on estrogen receptor: A combined molecular dynamics and experimental study*, Ecotoxicol. Environ. Saf. 172, 2019, 373.
4. F. Zamani et al., *In "Nanostructures for Drug Delivery"*, Elsevier 2017, 239.
5. M. Kamel et al., *Assessment of the adsorption mechanism of Flutamide anticancer drug on the functionalized single-walled carbon nanotube surface as a drug delivery vehicle: An alternative theoretical approach based on DFT and MD*, Appl. Surf. Sci. 434, (2018), 492.
6. M. Sheikhi et al., *Adsorption properties of the molecule resveratrol on CNT (8, 0–10) nanotube: geometry optimization, molecular structure, spectroscopic (NMR, UV/Vis, excited state), FMO, MEP and HOMO-LUMO investigations*, J. Mol. Struct. 1160, 2018, 479.
7. M. Lotfi et al., *Comprehensive quantum chemical insight into the mechanistic understanding of the surface functionalization of carbon nanotube as a nanocarrier with cladribine anticancer drug*, Appl. Surf. Sci. 462, 2018, 720.
8. H. Liu et al., *Translocation of Single-Stranded DNA Through Single-Walled Carbon Nanotubes*, Science 327, 2010, 5961, 64.
9. Ch.Y. Lee et al., *Coherence resonance in a single-walled carbon nanotube ion channel*, Science 329, 2010, 5997, 1320.
10. J. Geng et al., *Stochastic transport through carbon nanotubes in lipid bilayers and live cell membranes*, Nature 514, 2014, 612.
11. L. Liang et al., *DNA fragment translocation through the lipid membrane assisted by carbon nanotube*, Int. J. Pharm. 574, 2020, 118921.
12. X. Yang et al., *Multi-functionalized single-walled carbon nanotubes as tumor cell targeting biological transporters*, J Nanopart Res 10, 2008, 815.
13. A. De La Zerda et al., *Carbon nanotubes as photoacoustic molecular imaging agents in living mice*, Nature Nanotech 3, 2008, 557.
14. N.W. Shi Kam et al., *Nanotube molecular transporters: internalization of carbon nanotube– protein conjugates into mammalian cells*, J. Am. Chem. Soc. 126, 2004, 22, 6850.
15. D.B. Warheit et al., *Comparative Pulmonary Toxicity Assessment of Single-wall Carbon Nanotubes in Rats*, J. Toxicol. Sci. 77, 2004, 1, 117.
16. K.R. Karnati et al., *Understanding the co-loading and releasing of doxorubicin and paclitaxel using chitosan functionalized single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics simulations*, Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 2018, 14, 9389.
17. W.A. Scrivens et al., *Potent solvents for C₆₀ and their utility for the rapid acquisition of ¹³C NMR data for fullerenes*, Chem. Commun. 15, 1993, 1207.
18. R.S. Ruoff et al., *Solubility of fullerene (C₆₀) in a variety of solvents*, J. Phys. Chem. 97, 1993, 3379.
19. B. Koh et al., *Mechanisms of Carbon Nanotube Aggregation and the Reversion of Carbon Nanotube Aggregates in Aqueous Medium*, J. Am. Chem. Soc. 30, 2014, 36, 10899.
20. A. Casey, *Single walled carbon nanotubes induce indirect cytotoxicity by medium depletion in A549 lung cells*, Toxicol. Lett. 179, 2008, 2, 78.
21. A.A. Shvedova et al., *Mechanisms of pulmonary toxicity and medical applications of carbon nanotubes: Two faces of Janus?*, Pharmacol. Ther. 121, 2009, 192.

22. C.W. Lam et al., *Pulmonary toxicity of single-wall carbon nanotubes in mice 7 and 90days after intratracheal instillation*, J. Toxicol. Sci. 77, 2004, 126.
23. R. Wang et al., *Cytotoxicity screening of single-walled carbon nanotubes: detection and removal of cytotoxic contaminants from carboxylated carbon nanotubes*, Mol. Pharm. 8, 2011, 4, 1351.
24. R. Singh et al., *Binding and condensation of plasmid DNA onto functionalized carbon nanotubes: toward the construction of nanotube-based gene delivery vectors*, JACS 127, 2005, 12, 4388.
25. A. Bianco et al., *Biomedical applications of functionalised carbon nanotubes*, Chem. Commun 5, 2005, 571.
26. M. Prato et al., *Functionalized carbon nanotubes in drug design and discovery*, Acc. Chem. Res. 41, 2008, 1, 60.
27. N.W.S. Kam et al., *Carbon nanotubes as intracellular protein transporters: generality and biological functionality*, JACS 127, 2005, 16, 6021.
28. M. Mananghaya et al., *Theoretical investigation of the solubilization of COOH-functionalized single wall carbon nanotubes in water*, J. Mol. Liq. 215, 2016, 780.
29. K.K. Jain, *Advances in use of functionalized carbon nano-tubes for drug design and discovery*, Expert Opin Drug Discov. 7, 2012, 11, 1029.
30. A.R. Kiran et al., *Carbon nanotubes in drug delivery: Focus on anticancer therapies*, J. Drug Deliv. Sci Technol. 59, 2020, 101892.
31. S. Lokavee et al., *Molecular Dynamics Simulation of Bi-Carboxyl Sidewall Functionalized Single-wall Carbon Nanotubes in Water*, Adv. Mat. Res. 1131, 2016, 106.
32. A. C. T. van Duin et al., *ReaxFF: a reactive force field for hydrocarbons*, J. Phys. Chem. A 105, 2001, 9396.
33. M. Yusupov et al., *Reactive molecular dynamics simulations of oxygen species in a liquid water layer of interest for plasma medicine*, J. Phys. D: Appl. Phys. 47, 2014, 025205.
34. U. Khalilov et al., *Molecular evidence for feedstock-dependent nucleation mechanisms of CNTs*, Nanoscale Horiz. 4, 2019, 674.
35. C. Zou et al., *Molecular Dynamics Simulations of the Effects of Vacancies on Nickel Self-Diffusion, Oxygen Diffusion and Oxidation Initiation in Nickel, Using the ReaxFF Reactive Force Field*, Acta Mater. 83, 2015, 102.
36. H.J.C. Berendsen et al., *Molecular dynamics with coupling to an external bath*, J. Chem. Phys. 81, 1984, 8, 3684.
37. R.A. Bell et al., *Does water dope carbon nanotubes?*, J. Chem. Phys. 141, 2014, 16, 164703.