

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДЕНДРИМЕРОВ С БОЛЬШОЙ АСИММЕТРИЕЙ ВЕТВЛЕНИЯ МЕТОДОМ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ

Шавыкин О.В., Михайлов И.В.¹, Неелов И.М.¹, Даринский А.А.¹

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹Институт высокомолекулярных соединений, Санкт-Петербург, Российская Федерация
kupala-89@mail.ru

Дендримеры представляют собой класс регулярно разветвленных макромолекул с высокой степенью монодисперсности и большим числом концевых групп способных к функционализации, что делает эти молекулы перспективными для применения в биологии и наномедицине. Исследованию их структурных и динамических свойств посвящено большое число экспериментальных и теоретических работ. Одним из наиболее детальных методов теоретического исследования является компьютерное моделирование. Основное число работ по моделированию дендримеров посвящено дендримерам с симметричным ветвлением, в которых длина спейсеров между всеми точками ветвления одинакова. Однако, наряду с такими дендримерами существуют дендримеры с асимметричным ветвлением, в которых спейсеры исходящие из точки ветвления имеют разные длины. Проведённое ранее моделирование дендримеров с небольшой асимметрией ветвления (2:1) методом Броуновской динамики показало [1], что их структурные характеристики практически нечувствительны к асимметрии ветвления.

В настоящей работе тем же методом рассматриваются дендримеры различных поколений при существенно большем значении асимметрии ветвления. Изучено влияние асимметрии ветвления как на глобальные характеристики дендримера (радиус инерции, расстояние от ядра до концевых групп, асферичность), так и на характеристики внутренней структуры (профиль плотности, распределение концевых групп и др.). Показано, что влияние асимметрии на внутреннюю структуру дендримера оказывается заметно сильнее, чем на его глобальные характеристики. В частности, изменение распределения концевых групп в асимметричных дендримерах может приводить к изменению их способности к функционализации.

Эта работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-03-00775. Расчеты проводились на суперкомпьютерном комплексе МГУ «Ломоносов» [2].

Литература.

1. Михайлов И.В., Даринский А.А. Влияет ли симметрия ветвления на свойства дендримеров? // Высокомолек. Соед. А., Т. 56, № 4, 2014, Стр. 452-463.
2. Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов. А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад. В. Практика суперкомпьютера "Ломоносов" // Открытые системы, №7, 2012, Стр. 36-39.