

УДК 539.21

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ЦИКЛИЧЕСКИХ ДЕНДРОННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЩЕТОК

Семишин П. С. (ИТМО)

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, Борисов О. В. (ИТМО)

Введение. Циклические полимеры представляют собой перспективный класс полимеров. Они оказывают глубокое влияние на характеристики материалов в широком спектре применений, а также часто приводят к сильному изменению физико-химических свойств растворов, расплавов и сыпучих материалов, обладают исключительными свойствами и повышенными эксплуатационными характеристиками по сравнению с материалами на основе линейных полимерных аналогов. В биомедицинском контексте биоматериалы на основе циклических полимеров демонстрируют особые свойства с точки зрения биораспределения, фармакокинетики, эффективности доставки лекарственных средств или генов и поверхностной активности. Топологические эффекты полимеров с циклической архитектурой все чаще используются для изготовления различных материалов для диагностики и биовизуализации, тканевой инженерии и в качестве антибактериальных покрытий. [1-2]

Для создания циклического полимера с заданными свойствами необходимо проведение предварительного компьютерного моделирования. Такое моделирование позволяет выявить закономерности в поведении и структуре полимеров в растворе или расплаве, определить наиболее подходящие числовые значения параметров макромолекулы для конкретного практического применения. На сегодняшний день хорошо описаны модели разветвленных и неразветвленных линейных полимеров, однако публикаций по теме моделирования циклических макромолекул пока не так много.

В основном для моделирования в работах используется метод Монте-Карло или метод молекулярной динамики и анализируются такие параметры как конформация молекулы, персистентная длина, радиус инерции, поведение молекулы при переходе из одного растворителя в другой и т. д. [3]

Основная часть. В данной работе объектом исследования являются циклические дендронные молекулярные щётки, т. е. циклические щетки с боковыми цепями в виде дендронов. Их поведение в растворе моделируется при помощи метода диссипативной динамики частиц (DPD). Данный метод является огрубленным методом, отдельные группы атомов, мономерные звенья и кластеры молекул растворителя рассматриваются как мягкие сферы. Взаимодействия между этими сферами заменяются упрощенными попарными, диссипативными, консервативными и случайными силами. Основное преимущество данного метода заключается в том, что он позволяет рассматривать молекулярные системы на большем временном и атомном масштабе, чем полноатомное молекулярно-динамическое моделирование [4]. В данной работе рассмотрены зависимости среднего размера и формы циклических дендронных щёток от их молекулярной архитектуры. Рассчитаны степени набухания рассмотренных разветвленных полимеров. Проведено сопоставление полученных данных при разных степенях полимеризации и разветвлённости привитых дендронов.

Выводы. Проведено исследование влияния прививки дендронов на размеры циклических полимеров в условиях хорошего и плохого растворителя, а также поведения привитых цепей в молекулах с фиксированной и свободной основной цепью. Степень набухания циклических дендронных щёток при переходе из условий плохого растворителя в условия хорошего растворителя незначительно зависит от архитектуры прививаемых дендронов и колеблется около некоторого постоянного значения. При увеличении молекулярной нагрузки на основную цепь, конформация основной цепи стремится не к

форме кольца, а к форме «кресла».

Полученные данные можно использовать для дальнейших работ по моделированию циклических дендронных молекулярных щеток.

Список использованных источников:

1. Golba B., Benetti E. M., De Geest, B. G. Biomaterials applications of cyclic polymers // *Biomaterials* – 2020. – 267(10):120468.
2. Xiao H., Luo C., Yan D., Sommer, J.-U. Molecular Dynamics Simulation of Crystallization Cyclic Polymer Melts As Compared to Their Linear Counterparts // *Macromolecules*. – 2017. – 50(24), 9796–9806.
3. Borisov O. V., Polotsky A. A., Rud O. V., Zhulina E. B., Leermakers F. A. M., Birshtein T. M. Dendron brushes and dendronized polymers: a theoretical outlook. // *Soft Matter*. – 2014 – 10(13), 2093–2101.
4. Hu-Jun Qian, Zhong-Yuan Lu, Li-Jun Chen, Ze-Sheng Li, and Chia-Chung. Computer Simulation of Cyclic Block Copolymer Microphase Separation. // *Sun State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry*. – 2004. – V. 17 – 8331-8342.