

УДК 544.77.051

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ¹

Малышев М.Д., Бабуркин П.О., Хижняк С.Д., Пахомов П.М.

*Тверской государственный университет
170002, г. Тверь, Садовый переулок, д. 35
e-mail: bggf@bk.ru*

Отличительная способность супрамолекулярных гидрогелей на основе цистеин-серебряного раствора (ЦСР) – способность к гелеобразованию при очень низкой концентрации реагентов $\sim 0.01\%$ за счет обратимых межмолекулярных связей после введения различных солей металлов. В докладе обсуждается построение модели созревания цистеин-серебряного раствора (ЦСР). Для реализации модели мы используем метод атомистической молекулярной динамики (МД). С помощью созданной модели было выполнено изучение кинетики формирования кластеров меркаптида серебра (МС) из компонентов раствора и их физико-химических свойств. Анализ результатов расчетов позволил лучше понять, почему ЦСР обладает способностью к самоорганизации на больших масштабных уровнях. Дополнительно, в рамках метода функционала электронной плотности было изучено взаимодействие цвиттер-ионов МС друг с другом и различными ионами, содержащимися в растворе. Эти расчеты позволили подтвердить корректность МД моделирования. Полученные результаты полезны для понимания механизма самоорганизации супрамолекулярных систем на основе серосодержащих аминокислот, реализации управляемой самосборки наноразмерных частиц и позволяют сформулировать рекомендации для синтеза новых низкомолекулярных загустителей. В целом результаты подтверждают, что гель-сетка в ЦСР образуется за счет формирования водородных связей между NH_3^+ и $\text{C}(\text{O})\text{O}^-$ группами на поверхности агрегатов.

¹ Работа выполнена в рамках НИР по заданию Минобрнауки России на 2017-2019, № 4.2246.217/ПЧ. Авторы так же выражают благодарность фонду РФФИ за финансовую поддержку, проект № 18-33-00146, и МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов кластера МВС-100k