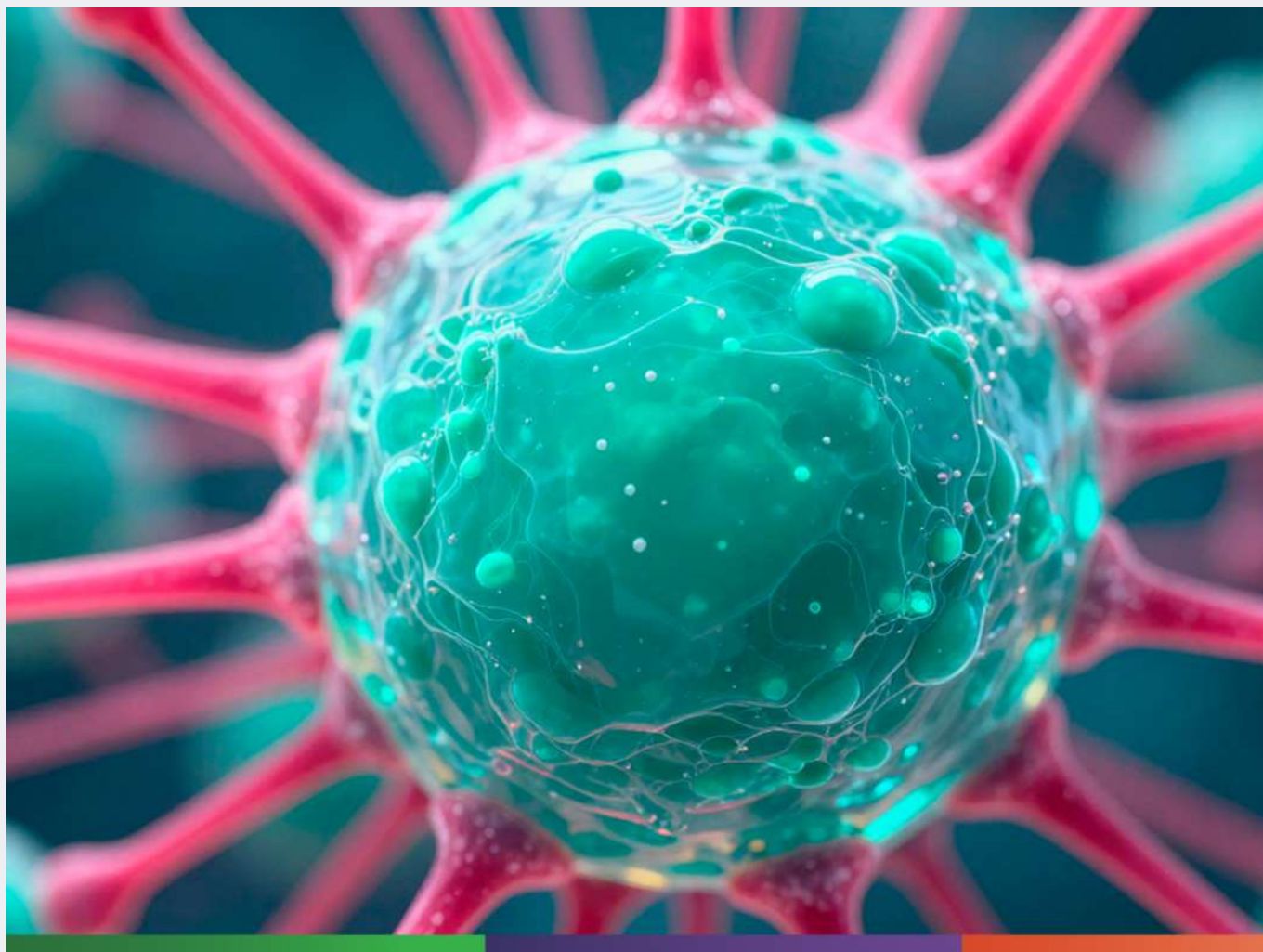


Механизм «предпочтений» наночастиц в сложных жидкостях



Исследование микромира, где молекулы самоорганизуются в сложные структуры, критически важно для развития фармакологии, нанотехнологий и «зеленой» химии.

Одной из ключевых задач является понимание того, как наноразмерные частицы, такие как мицеллы, взаимодействуют с окружающей их жидкостью. Эти знания позволяют целенаправленно создавать системы для доставки лекарств, управления химическими реакциями или очистки окружающей среды. Однако прямое моделирование поведения реальных мицелл, размеры которых могут достигать микрометров, до сих пор было практически невозможным из-за колоссальных вычислительных затрат, требующихся для атомарно-точного описания.

В статье, опубликованной в журнале *Journal of Molecular Liquids* (кварталь Q1), научный коллектив под руководством доцента Высшей школы высоковольтной энергетики Надежды Андреевой предложил и успешно применил инновационный вычислительный протокол для решения этой задачи. Объектом изучения стали мицеллы докузата натрия — популярного поверхностно-активного вещества — в смеси воды и диметилсульфоксида, мощного универсального растворителя.

Чтобы обойти ограничения классической молекулярной динамики, авторы представили ядро мицеллы и объемный растворитель в виде двух отдельных непрерывных фаз, моделируемых независимо. Это позволило с помощью расчетов свободной энергии сольватации количественно оценить термодинамическое сродство молекул воды и ДМСО к мицеллярной фазе и определить коэффициенты распределения между фазами. Такой подход впервые позволил заглянуть внутрь микрометровых мицелл с атомарным разрешением, не моделируя их целиком.

Ключевым результатом работы стало прямое количественное доказательство сильного предпочтительного проникновения ДМСО в гидрофобное ядро мицелл. Авторы продемонстрировали, что молярная доля ДМСО в ядре резко возрастает с 13.3% до 47.3% по мере увеличения его содержания в объемной смеси с 10 до 50 мол.%. Это обусловлено более выгодной свободной энергией сольватации для ДМСО (-23.8 кДж/моль) по сравнению с водой (-12.6 кДж/моль). Интересно, что кооперативные взаимодействия между самими молекулами ДМСО внутри мицеллы дают дополнительную стабилизацию в ~4-5 кДж/моль.

Оригинал статьи: [REDACTED]

