

Компьютерное моделирование структурообразования в водных растворах лецитина и соли желчной кислоты

А.А. Маркина¹, В.А. Иванов¹, П.В. Комаров^{2,3}, А.Р. Хохлов¹, S.-H. Tung⁴

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова¹, Институт элементоорганических соединений РАН², Тверской государственный университет³, National Taiwan University⁴

В последнее время большое внимание уделяется проблеме разработки наноструктурированных материалов методами самосборки на основе низкомолекулярных веществ [1,2]. Для этого нужно понять, как можно управлять процессами самосборки молекул, и найти подходящие молекулярные структуры, которые в будущем смогут послужить базой для создания молекулярных устройств. Помочь разобраться в том, как происходят такие процессы, могут смеси простых молекул, способных образовывать надмолекулярные структуры, возникающие как за счет внутренних факторов, так и посредством специфических воздействий извне. В качестве простой системы, способной к самосборке, может рассматриваться водный раствор на основе лецитина, относящегося к группе простых липидов и проявляющего свойства поверхностно активного вещества, способного формировать при определенных условиях мицеллы и везикулы [3]. Добавление солей желчных кислот индуцирует образование вытянутых структур, имеющих форму эллипсоидов и цилиндрических мицелл [3].

В докладе обсуждаются первые результаты моделирования эффекта добавления неорганической соли (NaCl) на морфологию надмолекулярных образований в водных растворах смеси лецитина и соли желчной кислоты. Следует отметить, что такие системы ранее не исследовались методами компьютерного моделирования. Самосборка на основе липидов и отдельно с участием веществ на основе холестерина рассматривалась в работах [5-7].

Все расчеты мы выполнили с помощью метода диссипативной динамики частиц (DPD) [4]. Мы использовали модифицированную нами программу DPDCHEM [8]. Реализация программы основана на использовании алгоритма распараллеливания data-decomposition. Главными параметрами выполненных расчетов были концентрации лецитина, соли желчной кислоты и NaCl. Добавление неорганической соли учитывалось в модели неявным образом.

Использование распараллеленных вычислений, выполненных на кластере «Ломоносов» Суперкомпьютерного центра МГУ, позволило реализовать моделирование достаточно больших ячеек вещества в течение продолжительных интервалов времени в широком диапазоне выбранных параметров. В зависимости от размера системы моделирование было выполнено с использованием от 8 до 64 процессоров узлов кластера. Выбор числа процессоров определялся исходя из компромисса реализации моделирования большого числа образцов выбранной системы (для разных параметров) на больших масштабах времени (позволяющих проследить тенденции самосборки) и минимизации общих затрат времени за счет масштабируемости используемой программы.

Был зафиксирован эффект влияния соли на изменение морфологии агрегатов лецитина и соли желчной кислоты. В зависимости от концентрации соли мы наблюдали трансформацию эллипсоидальных и цилиндрических структур в длинные червеобразные мицеллы. Такие длинные гибкие червеобразные мицеллы могут вызвать экспериментально наблюдаемое повышение вязкости раствора лецитина [3].

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова при финансовой поддержке РФФИ (грант 14-03-92004-ННС_а).

Литература

1. Wu Z., Yan Y., Huang J. // Langmuir 2014. Vol. 30. P. 14375.
2. Kang Y., Liu K., Zhang X. // Langmuir 2014. Vol. 30. P. 5989.

3. Cheng C.-Y., Oh H., Wang T.-Y., Raghavan S.R., Tung S.-H. // *Langmuir* 2014. Vol. 30 P.10221.
4. Groot R.D., Warren P.B. // *J. Chem. Phys.* 1997. Vol. 107. P. 4423.
5. Guo X.D., Zhang L.J., Wu Z.M., Qian Y. // *Macromolecules* 2010. Vol. 43. P. 7839.
6. Stansfeld P.J., Sansom M.S.P. // *J. Chem. Theory Comput.* 2011. Vol. 7. P. 1157.
7. Mirzoev A., Lyubartsev A.P. // *J. Chem. Theory Comput.* 2013. Vol. 9. P. 1512.
8. URL: http://polymer.physik.uni-ulm.de/~khalatur/exchange/DPD_Chem/team.htm