

## Компьютерное моделирование электромеханических свойств полиэлектролитных микро- и нанокапсул

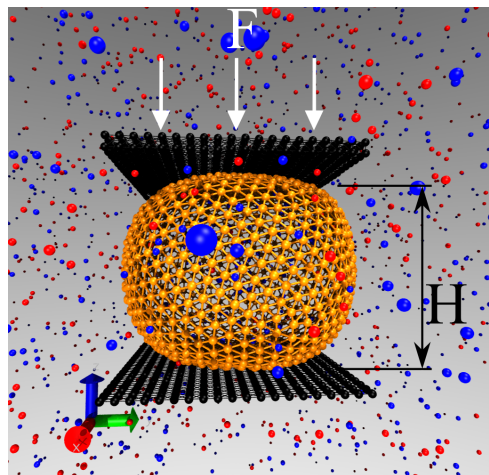
Руководитель: проф., д.ф.-м.н. Виноградова О.И.

Микрошефы: Мадуар С.Р. (salmad@ya.ru), Молотилин Т.Ю.

Полиэлектролитные микро- и нанооболочки представляют особый интерес как контейнеры для капсулирования и последующей направленной доставки. При изменении условий окружающей среды, таких как pH, концентрация внешнего или внутреннего раствора электролита и полиэлектролита, капсулы могут деформироваться (набухать [1], сжиматься и даже коллапсировать [2, 3] с высвобождением заключенного внутри вещества). Эта деформация под действием внешних условий определяется электромеханическими свойствами оболочки капсулы, которые зависят как от модуля Юнга и коэффициента Пуассона, так и от её заряда.

В нашей лаборатории мы теоретически изучаем механику микро- и нанокапсул в растворах электролитов, а также проводим компьютерное моделирование этих систем. Наш компьютерный эксперимент имитирует такие реальные эксперименты в лабораториях, как, например, набухание или изгиб капсул или их сжатие коллоидным зондом атомно-силового микроскопа. Мы предлагаем студентам научиться компьютерному моделированию в программном пакете ESPResSo [4], а затем изучить их механические и адгезионные свойства в зависимости от параметров системы.

Студенту предоставится отличная возможность подробнее изучить физику полимеров и коллоидных систем, теорию упругости, электростатику, метод молекулярной динамики. Кроме того, мы поможем профессионально овладеть такими языками программирования, как Python, C, C++ (что-то одно или все сразу). А еще мы научим вас использовать графические пакеты VMD и PyMol для создания рисунков и анимации!



### Список литературы

- [1] Vinogradova O. I., Andrienko D., Lulevich V. V. et al. Young's Modulus of Polyelectrolyte Multilayers from Microcapsule Swelling // *Macromolecules*. 2004. Vol. 37, no. 3. P. 1113–1117.
- [2] Gao C., Donath E., Moya S. et al. Elasticity of Hollow Polyelectrolyte Capsules Prepared by the Layer-by-Layer Technique // *Eur. Phys. J. E*. 2001. Vol. 5, no 1. P. 21–27.
- [3] Gao C., Leporatti S., Moya S. et al. Swelling and Shrinking of Polyelectrolyte Microcapsules in Response to Changes in Temperature and Ionic Strength // *Chem. Eur. J*. 2003. Vol. 9, no. 4. P. 915–920.
- [4] Limbach H., Arnold A., Mann B., Holm C. ESPResSo - an Extensible Simulation Package for Research on Soft Matter Systems // *Comput. Phys. Commun.* 2006. Vol. 174. P. 704 – 727.