

Компьютерное моделирование микро- и наногелей.

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

Микрошефы: Молотилин Т.Ю. (taras.molotilin@gmail.com), Мадуар С.Р.

Микрогели являются редким примером системы, сочетающей в себе свойства свободных полимеров и коллоидных частиц. Они набухают и коллапсируют под действием внешних воздействий (температура, осмотическое давление), а заряженные микрогели известны тем, что их плотность перераспределяется в зависимости от pH и концентрации электролита.

Все это в сочетании с характерными свойствами коллоидных частиц (диффузионная и электрофоретическая подвижность, образование устойчивых суспензий) делает микрогели перспективными контейнерами для адресной доставки. За счет большой проницаемости полимерной сетки в набухший микрогель сравнительно легко диффундируют низкомолекулярные вещества, а во время коллапса геля они высвобождаются.

У нас в лаборатории мы занимаемся компьютерным моделированием заряженных и незаряженных микрогелей в различных ‘виртуальных экспериментах’: атомно-силовой микроскопии, микрокапиллярных измерениях, оптических пинцетах. Мы также приступаем к изучению поведения микрогелей в таких явлениях, как смачивание и электрофорез, поэтому приглашаем студентов для выполнения дипломных и курсовых работ.

Мы научим вас методам мезоскопического моделирования полимерных и коллоидных систем, поможем разобраться в физике полимеров, теории упругости и электростатике. Кроме того, вы научитесь программировать на языках Python 2, C/C++ и tcl. А если захотите – мы покажем, как пользоваться пакетами VMD, PyMol и Blender для создания красивых научных иллюстраций.

