Проект направлен на изучение механизмов межмолекулярных взаимодействий дендримеров высоких генераций в расплавах и концентрированных растворах на основе комплексного подхода, включающего экспериментальные и теоретические исследования.

На первом этапе выполнения проекта в ходе экспериментальных исследований особенностей реологического поведения расплавов полибутилкарбосилановых дендримеров с четырехфункциональным ядром и трехфункциональными атомами ветвления (4-3) шестой (G6), седьмой (G7) и восьмой (G8) генерации были проведены эксперименты по ползучести и релаксации напряжений после снятия нагрузки, а также изучены вязкоупругие свойства расплавов методом динамического механического анализа в режиме синусоидальных колебаний. Определена вязкость расплава дендримера G6 выше предела текучести. Энергия активации вязкого течения для G6 равна 28 кДж/моль. При низких частотах сдвигового воздействия дендример G6 демонстрирует поведение, характерное для жидкостей, а при частотах выше 0.3 рад/с материал ведет себя как твердое тело. Дендримеры G7 и G8 демонстрируют поведение, характерное для эластомеров, во всем диапазоне частот. При увеличении температуры наблюдается рост как действительной, так и мнимой компонент динамического модуля сдвига для G7 и G8.

Компьютерное моделирование проводилось параллельно по нескольким направлениям, связанным с изучением поведения дендримеров при одноосном сжатии в зависимости от генерации, а также с разными аспектами поведения дендримеров в блоке. На основе программного пакета PUMA был разработан модуль, позволяющий проводить компьютерное моделирование одноосного сжатия одиночных молекул между двумя параллельными плоскостями, и исследовано поведение полибутилкарбосилановых дендримеров 4-3 с четвертой по седьмую генерацию при температуре 350 К. Было обнаружено различие в поведении дендримеров малых и больших генераций. Для дендримеров малых генераций существует достаточно большой диапазон степеней сжатия, при которых внутренние топологические слои дендримера сохраняют начальную конформацию. При этом, даже при максимальной степени сжатия изменение конформаций внутренних слоев заметно слабее, чем внешних. В случае высоких генераций изменению подвергается сразу вся структура, причем при снятии нагрузки сжатое состояние сохраняется в течении длительного времени.

В рамках полноатомного моделирования получены траекторные файлы расплавов полибутилкарбосилановых дендримеров 5-й, 6-й и 7-й генераций. Расчетные ячейки содержали по 27 молекул дендримеров. Расчеты проведены для двух наборов температур: 300, 350, 400, 500, 600 К и 273, 293,313, 333, 353, 373 К. Для каждого расплава при каждой температуре получены траектории для 8 независимых реализаций. Достигнутые в этом году длины траекторий для расплавов дендримеров 5-й генерации – 50 нс, 6-й генерации – 40 нс, 7-й генерации – 20 нс.

Проведено исследование методом молекулярной динамики структуры и внутримолекулярной динамики расплавов двух типов силоксановых дендримеров с разной длиной спейсера. Изучены зависимости плотности и коэффициентов теплового расширения расплавов от температуры, номера генерации и типа дендримеров. Проведен анализ формы и размера молекул дендримера в расплаве, радиальных профилей плотности и внутримолекулярной динамики в сравнении. Детально изучено взаимодействие и взаимопроникновение молекул дендримеров в расплаве. По результатам работы подготовлена статья и подана в печать в высокорейтинговый журнал Soft Matter.