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 втором этапе выполнения проекта в ходе экспериментальных исследований особенностей реологического поведения расплавов гибридных карбосилановых дендримеров с силоксановой оболочкой четвертой (G4), шестой (G6) и седьмой (G7) генерации обнаружен резкий рост вязкости при переходе от G4 к G6. Показано, что расплавы дендримеров G4 являются ньютоновскими жидкостями, а G6 и G7 демонстрируют поведение, характерное для твердых тел. Аналогичный скачок вязкости наблюдался ранее для расплавов полибутилкарбосилановых дендримеров. Замена бутильных групп на силоксановые сегменты не привела к качественному изменению реологического поведения расплавов, что может свидетельствовать об универсальности явления перехода жидкость-твердое тело при увеличении номера генерации, в основе которого лежит в специфическое древовидное строение дендримерных макромолекул. Были созданы полноатомные модели гибридных карбосилан-силоксановых дендримеров, проведено компьютерное моделирование одиночных дендримеров 4-ой, 6-ой и 7-ой генераций. Хорошее согласие между данными моделирования и малоуглового рентгеновского рассеяния подтвердило правильность разработанных моделей.

Продолжены исследования методом компьютерного моделирования конформационного поведения силикон-содержащих дендримеров при различных внешних воздействиях в зависимости от генерации. В частности, в рамках полноатомного моделирования изучены механизмы адсорбции дендримеров G4-G7 четырех гомологических рядов: двух типов карбосилановых дендримеров с трех- и четырех-функциональным ядром и двух типов силоксановых дендримеров с различной длиной спейсеров. Показано, что карбосилановые дендримеры выше G4, в основном, взаимодействуют с поверхностью внешними слоями, сохраняя конформации внутренних слоев неизменными, в то время как силоксановые дендримеры по 6-ую генерацию адсорбируются преимущественно внутренней областью, растекаясь по поверхности. Силоксановые дендримеры с коротким спейсером, содержащим только один атом кислорода, обладают плотной молекулярной структурой и слабо меняют свои размеры в области изученных энергий адсорбции. Поведение дендримеров G7 практически не зависит от природы и строения дендримера, ключевую роль при их адсорбции играет плотная молекулярная структура. Для изучения поведения карбосилановых дендримеров при одноосном сжатии, начатого на предыдущем этапе в пакете PUMA, проведен перевод параметров системы для дальнейшего моделирования в программном пакете GROMACS для анализа динамики системы на больших временах.

Продолжено моделирование расплавов полибутилкарбосилановых дендримеров 4-3 с 4 по 7 генераций в широком диапазоне температур от 300 до 600 К в ячейке с 27 молекулами, а также выполнена постановка новых серий вычислительных экспериментов для расплавов дендримеров с различными начальными укладками: объемно-центрированной кубической (в расчетной ячейке 16 молекул или 8 кристаллографических ячеек), гранецентрированной кубической (32 молекулы или 8 кристаллографических ячеек), гексагональной плотной (27 молекул или 27 косоугольных кристаллографических ячеек). Проведено моделирование 8 ансамблей в пакете PUMA, а также получены длинные траектории от 150 до 300 нс в пакете GROMACS. Показано, что дендримеры способны подстроиться под внешнее окружение и равномерно заполнить все доступное пространство, не оставляя полостей.

По результатам работы на данном этапе подготовлены две статьи, которые поданы в печать в высокорейтинговый журнал Polymers.