

Целью данной работы являлось изучение влияния pH среды на устойчивость водных суспензий нано- и микропорошков оксидов алюминия и железа.

В работе использовались образцы нанопорошков оксида алюминия 42n, 95n, 117nf ($S_{уд} = 30, 44$ и $20 \text{ м}^2/\text{г}$, соответственно), образец нанопорошка оксида железа ($S_{уд} = 50 \text{ м}^2/\text{г}$), а также образец микропорошка оксида алюминия IAM ($S_{уд} = 8,9 \text{ м}^2/\text{г}$). Все порошки, кроме IAM, были получены в лаборатории импульсных процессов Института электрофизики УрО РАН. Суспензии образцов Al_2O_3 42n, 95n, 117nf были приготовлены диспергированием соответствующих нанопорошков в воде ультразвуком. Для приготовления суспензий нанопорошка FeO_x и микропорошка Al_2O_3 IAM был использован дисперсант цитрат натрия. Концентрация дисперсанта составляла 0,4% относительно массы порошка в суспензии.

Методом динамического светорассеяния на анализаторе Brookhaven ZetaPlus для всех суспензий была определена зависимость размера частиц и ζ -потенциала от pH среды в присутствии фонового электролита KNO_3 с концентрацией 1 ммоль/л и 10 ммоль/л. Определение pH суспензий было осуществлено комбинированным стеклянным электродом, подключенным к анализатору Brookhaven ZetaPlus.

Зависимость размера частиц от pH среды имеет экстремальный характер. Максимум размера частиц находится вблизи изоэлектрической точки суспензий.

Работа была проведена в сотрудничестве с ИЭФ УрО РАН и УГМА.

Авторы благодарят за финансовую поддержку фонд CRDF (грант Y3-CE-05-19, грант PG07-005-02) и фонд РФФИ (гранты 07-03-96103, 08-02-99076).

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСТЯЖЕНИЯ МАКРОМОЛЕКУЛЫ

Ляпунова Д.И., Михайлов И.В.

Тверской государственный университет

В связи с широкой распространенностью полимерных структур в природе и их огромным значением для жизнедеятельности живых организмов в последние годы возникли попытки понять механизм самосборки белковых глобулярных структур путем постепенного растягивания молекулы за концы. Причем подобные эксперименты делаются на атомно-силовом микроскопе и выполняется моделирование этого процесса методами молекулярной динамики. Но простого соотношения между

структурой белка и его механической стабильностью не существует. Даже небольшие изменения в аминокислотной последовательности могут существенно повлиять на механические свойства белка. Поэтому нами смоделирован процесс растяжения простейшей гомополимерной и гетерополимерной мультиблочной цепей.

Цель работы: изучение закономерностей растяжения полимерной глобулы за концы цепи методом ланжевеновской динамики. В работе используется обобщенная модель свободно-сочлененной цепи. В рамках этой модели цепи, все связи моделировались как жесткие геометрические ограничения фиксированной длины ($l\sigma$), и ван-дер-ваальсовы радиусы звеньев σ считались одинаковыми. Все отличие в свойствах «мономеров» определялось разницей энергетических параметров потенциалов межмолекулярного взаимодействия. На валентные и торсионные углы никаких ограничений не накладывалось.

Растяжение полимерной глобулы осуществляется несколькими способами: приложением к концевым атомам одноименных зарядов большой величины, растяжение глобулы происходит за счет их электростатического отталкивания; приложением к концевым атомам дополнительной постоянной силы, направленной вдоль линии, связывающей их, в противоположенные стороны; в атомно-силовой микроскопии наиболее часто реализуется режим растяжения с некоторой скоростью, при фиксации возникающих при этом сил.

В ходе работы было детально исследовано растяжение за счет электростатического отталкивания одноименных зарядов большой величины на концевых атомах и под воздействием постоянной растягивающей силы приложенной к концевым атомам глобулы. Изучались гомополимерные и гетерополимерные цепи с различными длинами блоков $n=1, 2, 3, 5, 10, 15, 30, 45$. Исследовались макромолекулы с длиной цепи $N=60, 90, 180$ звеньев. Получены зависимости величины растяжения от длины повторяющегося блока и величины растягивающей силы (и заряда). Для растяжения гомополимерной цепи требуется значительно большая сила, чем для такого же удлинения блоксополимера. Для мультиблочных цепей обнаружено, что характер зависимости растяжения цепи меняется при переходе от коротких блоков с длиной $n=1\div 5$ к более длинным, однако эта зависимость достаточно плавная, монотонно возрастающая. Растяжение цепи под действием постоянной силы носит скачкообразный характер, напоминающий фазовый переход.