

Компьютерное моделирование структурообразования в водных растворах лецитина и соли желчной кислоты

А.А. Маркина¹, В.А. Иванов¹, П.В. Комаров^{2,3}, А.Р. Хохлов¹, S.-H. Tung⁴

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова¹, Институт элементоорганических соединений РАН², Тверской государственный университет³, National Taiwan University⁴

В последнее время большое внимание уделяется проблеме разработки наноструктурированных материалов методами самосборки на основе низкомолекулярных веществ [1,2]. Для этого нужно понять, как можно управлять процессами самосборки молекул, и найти подходящие молекулярные структуры, которые в будущем смогут послужить базой для создания молекулярных устройств. Помочь разобраться в том, как происходят такие процессы, могут смеси простых молекул, способных образовывать надмолекулярные структуры, возникающие как за счет внутренних факторов, так и посредством специфических воздействий извне. В качестве простой системы, способной к самосборке, может рассматриваться водный раствор на основе лецитина, относящегося к группе простых липидов и проявляющего свойства поверхностно активного вещества, способного формировать при определенных условиях мицеллы и везикулы [3]. Добавление солей желчных кислот индуцирует образование вытянутых структур, имеющих форму эллипсоидов и цилиндрических мицелл [3].

В докладе обсуждаются первые результаты моделирования эффекта добавления неорганической соли (NaCl) на морфологию надмолекулярных образований в водных растворах смеси лецитина и соли желчной кислоты. Следует отметить, что такие системы ранее не исследовались методами компьютерного моделирования. Самосборка на основе липидов и отдельно с участием веществ на основе холестерина рассматривалась в работах [5-7].

Все расчеты мы выполнили с помощью метода диссипативной динамики частиц (DPD) [4]. Мы использовали модифицированную нами программу DPDCHEM [8]. Реализация программы основана на использовании алгоритма распараллеливания data-decomposition. Главными параметрами выполненных расчетов были концентрации лецитина, соли желчной кислоты и NaCl. Добавление неорганической соли учитывалось в модели неявным образом.

Использование распараллеленных вычислений, выполненных на кластере «Ломоносов» Суперкомпьютерного центра МГУ, позволило реализовать моделирование достаточно больших ячеек вещества в течение продолжительных интервалов времени в широком диапазоне выбранных параметров. В зависимости от размера системы моделирование было выполнено с использованием от 8 до 64 процессоров узлов кластера. Выбор числа процессоров определялся исходя из компромисса реализации моделирования большого числа образцов выбранной системы (для разных параметров) на больших масштабах времени (позволяющих проследить тенденции самосборки) и минимизации общих затрат времени за счет масштабируемости используемой программы.

Был зафиксирован эффект влияния соли на изменение морфологии агрегатов лецитина и соли желчной кислоты. В зависимости от концентрации соли мы наблюдали трансформацию эллипсоидальных и цилиндрических структур в длинные червеобразные мицеллы. Такие длинные гибкие червеобразные мицеллы могут вызвать экспериментально наблюдаемое повышение вязкости раствора лецитина [3].

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова при финансовой поддержке РФФИ (грант 14-03-92004-ННС_а).

Литература

1. Wu Z., Yan Y., Huang J. // Langmuir 2014. Vol. 30. P. 14375.
2. Kang Y., Liu K., Zhang X. // Langmuir 2014. Vol. 30. P. 5989.

3. Cheng C.-Y., Oh H., Wang T.-Y., Raghavan S.R., Tung S.-H. // *Langmuir* 2014. Vol. 30 P.10221.
4. Groot R.D., Warren P.B. // *J. Chem. Phys.* 1997. Vol. 107. P. 4423.
5. Guo X.D., Zhang L.J., Wu Z.M., Qian Y. // *Macromolecules* 2010. Vol. 43. P. 7839.
6. Stansfeld P.J., Sansom M.S.P. // *J. Chem. Theory Comput.* 2011. Vol. 7. P. 1157.
7. Mirzoev A., Lyubartsev A.P. // *J. Chem. Theory Comput.* 2013. Vol. 9. P. 1512.
8. URL: http://polymer.physik.uni-ulm.de/~khalatur/exchange/DPD_Chem/team.htm

Computer modeling of structure formation in aqueous solutions of lecithin and bile salts

Anastasia Markina, Viktor Ivanov, Pavel Komarov, Alexei Khokhlov and Shih-Huang Tung

Keywords: computer simulation, nanostructured materials, self-assembly

Recently, much attention is paid to the development of nanostructured materials by self-assembly. The report discusses the results of the first simulation of the effect of adding an inorganic salt on the morphology of supramolecular structures in aqueous solution of a mixture of lecithin and bile salts. All calculations were carried out in the framework of the dissipative particle dynamics. Using a parallelized computation performed on the cluster "Lomonosov" of the Supercomputer Center of Moscow State University, allowed to realize the modeling of large enough cells for extended time intervals over a wide range of parameters. We observed the effect of salt on the change in the morphology of aggregates of lecithin and bile salts. Depending on the concentration of salt, we observed transformation of ellipsoidal or cylindrical structures in long worm-like micelles. These long, flexible worm-like micelles can cause the experimentally observed increase in the viscosity of the solution of lecithin.