

Отчет по проекту РФФИ_{мол} нр №15-33-50950

Руководитель – Е.В. Лебедева

**Конформационные, оптические и гидродинамические свойства макромолекул
производных растительных полисахаридов**

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами молекулярной гидродинамики и оптики получены основные гидродинамические, оптические и конформационные характеристики гидроксиэтилкрахмала и гидроксиэтилкрахмала, модифицированного диалкилфенолом (диборнолом), водорастворимого пектинового полисахарида, выделенного из древесной зелени хвойных растений – галактуронана, декстранов и их сульфатированных производных в водно-солевых растворах NaCl и гидрозолей нанокристаллической целлюлозы. Определена оптическая анизотропия сегмента гидроксиэтилкрахмала. Обнаружено ассоциирование в растворах модифицированного гидроксиэтилкрахмала. Для галактуронана по соотношению Флори оценена величина равновесной жесткости сегмента цепи $A = 22$ нм. Обнаружена склонность к ассоциированию декстранов после их сульфатирования. Для молекул нанокристаллической целлюлозы определена величина оптического коэффициента сдвига и характеристическое значение угла ориентации в потоке.

Изучение характеристик сверхразветвленных пиридилфениленовых полимеров в растворе

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С 15.09.2015 по 15.11.2015 были изучены гидродинамические, оптические и конформационные свойства сверхразветвленных пиридилфениленовых полимеров с различными фокальными группами в растворе, синтезированные в группе макромолекулярной химии ИНЭОС РАН. Проведено всестороннее исследование характеристик полимеров в разбавленных растворах методами молекулярной гидродинамики (вискозиметрия, скоростная седиментация), оптики (динамическое рассеяние света, динамическое двойное лучепреломление в потоке) и электрооптики (двойное лучепреломление в электрическом поле). Получены основные гидродинамические характеристики этих «макромолекул-наночастиц» такие, как величина характеристической вязкости, удельного парциального объема, коэффициентов диффузии и седиментации, охарактеризованы молекулярные массы полимеров по седиментационно-диффузионному анализу для каждой из систем. Определена величина гидродинамического инварианта и эффективного гидродинамического диаметра макромолекул для исследуемых объектов. Изучено влияние температуры и растворителя на гидродинамические характеристики полимерных систем. Полученные значения величин оптического коэффициента сдвига для изучаемых полимеров оказались достаточно большими и характерны для молекул, не обладающих сферической симметрией.

Также проведены компьютерные расчеты для одной из исследуемых систем с использованием программы HyperChem. Рассчитаны величины коэффициентов диффузии, характеристической вязкости и гидродинамического инварианта для двух предельных случаев конформации полимерных структур: палочки и сферы. При сопоставлении экспериментальных данных и данных, полученных компьютерным расчетом, выявлено удовлетворительное соответствие. Сделанные расчеты также указывают на то, что форма исследуемой молекулы не является сферической.

Изучена динамика двойного лучепреломления в электрическом поле растворов сверхразветвленных пиридилфениленовых полимеров. Определены времена свободной τ_d и ориентационной τ_r релаксации молекул. Установлено, что наблюдаемое время свободной релаксации связано с вращательным движением ассоциатов, состоящих из нескольких макромолекул.

Отчет по проекту РФФИ мол_нр №15-33-51146

Руководитель – Ю.В.Чижов

- Моделирование методами квантовой химии мутаций, приводящих к гемофилии и локализованных в центре связывания иона меди в факторе VIII свертывания крови человека.

Научные результаты проекта:

В результате выполнения Проекта были получены данные об участии в связывании иона меди различных аминокислотных остатков фактора FVIII свертывания крови человека.

Установлен молекулярный механизм точечной мутации, локализованной в центре связывания иона меди и ведущей к развитию тяжелой формы гемофилии.

По результатам стажировки были опубликованы следующие работы:

1. Калимуллина Л.Р., Чижов Ю.В., «Квантово-химическое моделирование центра связывания меди в азурине», 3-я Всероссийская научная молодежная конференция «Актуальные проблемы нано-и микроэлектроники», Сб. докладов, 87, 1-4 декабря 2015, г. Уфа