

Abstrakt

Tato diplomová práce se věnuje studiu počítačových simulací interakcí blokových amfifilních kopolymerních dendrimerů v roztocích pomocí částicové disipativní dynamiky (DPD). Největší pozornost je věnována solubilizaci nízkomolekulárních látek do solvofobní části dendrimery. Studované dendrimery mají dvě vnitřní solvofobní patra a jedno nebo dvě vnější solvofilní patra. Solubilizovanou látkou je buď solvofobní monomer, nebo tetramer.

Úvodní část práce obsahuje základní informace o dendrimerech a popis simulační metody včetně použitých veličin.

Druhá část práce je věnována výsledkům simulací solubilizace nízkomolekulární solvofobní látky do kopolymerního dendrimery. Jsou v ní diskutovány a analyzovány nejdůležitější trendy chování velikosti a vnitřní struktury agregátů. Bylo zjištěno, že pro solubilizaci dostatečně velkého množství nízkomolekulární látky je nezbytné, aby byla solvofobní látka do dendrimerního jádra »přitahována«, tj. aby se rozpouštěla přednostně v jádře dendrimery. Solubilizace nízkomolekulární látky byla studována v závislosti na síle přitažlivé interakce a koncentraci monomeru, respektive tetrameru, a v závislosti na architektuře a složení kopolymerního dendrimery

Závěrem lze říci, že nejslibnější systémy pro aplikaci jsou ty s relativně dlouhým lineárním úsekem mezi větvicími body a dostatečným množstvím dostatečně dlouhých vnějších solvofilních pater. Vhodné jsou solvofobní látky, které jsou v dendrimerním jádře velmi dobře rozpustné. Taktéž použití oligomerních řetězců má příznivý vliv na jejich solubilizaci.

Klíčová slova: Disipativní částicová dynamika, počítačové simulace, amfifilní, kopolymery, dendrimery, selektivní rozpouštědlo, solubilizace, konformační chování