Рост дендримеров

1) В первом слое один мономер, связанный с тремя мономерами второго слоя. Начиная со второго слоя все мономеры образуют одну связь с молекулой предыдущего слоя и две связи – с молекулами последующего. Т.е. в каждом последующем слое число мономеров возрастает в два раза по сравнению с предыдущим. Тогда общее число мономеров будет равно:

$$n = 1+3+3\cdot 2+3\cdot 2^2+...+3\cdot 2^{N-1} = 1+3\sum_{k=0}^{N-1}2^k =$$

$$= 1+3\cdot\frac{2^N-1}{2-1} = 1+3\left(2^N-1\right) = 3\cdot 2^N-2$$

2) Максимальным радиусом дендримера будет расстояние, показанное на рисунке 3 красной линией, так как расстояние между мономерами, связанными через один, фиксировано и равно:

$$R_2 = \sqrt{r^2+r^2-2\cdot r\cdot r\cdot\cos 120^0} = \sqrt{r^2+r^2+r^2} = r\sqrt{3},$$

и при этом такие отрезки будут давать максимальный радиус, когда будут лежать на одной прямой. Тогда максимальный радиус будет равен:

$R_{2N} = N\cdot r\sqrt{3}$ для четного числа слоев;

$R_{2N+1} = \sqrt{r^2+R_{2N}^2+r\cdot R_{2N}\cdot\cos 120^0} = \sqrt{r^2+3N^2r^2+r^2\frac{N\sqrt{3}}{2}} = r\sqrt{3N^2+\frac{N\sqrt{3}}{2}+1}$ – для нечетного.

Далее для удобства примем $R_N = r\cdot\frac{N\sqrt{3}}{2}$

3) В слое с номером N_c число мономеров равно $3\cdot 2^{N_c-1}$, а занимаемая ими площадь – $3\cdot S\cdot 2^{N_c-2}$. Площадь сферы с радиусом R_{Nc} равна $4\pi R_{Nc}^2$

Тогда решая уравнение:

$$3\cdot S\cdot 2^{N_c-1} = 4\pi R_{Nc}^2$$

можно найти N_c . Это уравнение можно также переписать в виде

$$3\cdot S\cdot 2^{N_c-1} = 4\pi r^2\cdot\frac{3N_c^2}{4}$$

$$S\cdot 2^{N_c-1} = \pi r^2\cdot N_c^2$$

4) В дендримере с $N > N_c$ число мономеровможно представить как сумму двух слагаемых, одно из которых соответствует слоям до N_c, а другое после:

$$n_I = 3 \cdot 2^{N_c} - 2$$

$$n_{II} = \sum_{k=N_c+1}^{N} \frac{4\pi R_k^2}{S} = \sum_{k=N_c+1}^{N} \frac{4\pi r^2}{S} \cdot \frac{3N_c^2}{4} = \frac{3\pi r^2}{S} \sum_{k=N_c+1}^{N} k^2 = \frac{3\pi r^2}{S} \sum_{k=N_c+1}^{N} k^2$$

Или, учитывая, что число мономеров целое:

$$n_{II} = \left[\frac{3\pi r^2}{S}\right] \sum_{k=N_c+1}^{N} k^2 ,$$

где квадратные скобки обозначают целую часть.

Найдем $\sum_{k=N_c+1}^{N} N_c^2$:

$$\sum_{k=N_c+1}^{N} N_c^2 = \sum_{k=1}^{N} k^2 - \sum_{k=1}^{N_c} k^2 = \frac{N(N+1)(2N+1)}{6} - \frac{N_c(N_c+1)(2N_c+1)}{6}$$

Тогда

$$n_{0-Nc} = 3 \cdot 2^{N_c} - 2 + \left[\frac{3\pi r^2}{S}\right]\left(\frac{N(N+1)(2N+1)}{6} - \frac{N_c(N_c+1)(2N_c+1)}{6}\right)$$

5) Плотность дендримера будет быстро возрастать до достижения N_c, затем медленно выходит на предельное значение, которое соответствует плотной упаковке мономеров: