**Оптимизация бислойных структур в растворах амфифильных диблок-сополимеров с гребнеобразным блоком: компьютерное моделирование**

***Белкина К.А.1,2,Буглаков А.И.2***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*1Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Московская облаcть, Долгопрудный, Россия*

*2Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова*

*Российской академии наук, Москва, Россия
E-mail: belkina.ka**@phystech.ru*

Амфифильные сополимеры нашли широкое применение для создания функциональных материалов и средств доставки лекарственных агентов. Способность контролировать самоорганизацию таких полимеров является одной из ключевых задач при создании новых материалов. При этом желаемые свойства таких систем могут быть получены варьированием как архитектурных и молекулярных параметров полимера, так и качества растворителя. Введение в один из блоков амфифильности на уровне повторяющегося звена увеличивает функциональность таких полимеров, а также вносит новый характерный масштаб структурирования систем на их основе [1].

В данной работе в рамках мезоскопического компьютерного моделирования [2] была разработана схема направленного поиска параметров сополимеров, при которых наблюдается самосборка везикул в растворе амфифильных сополимеров. Исследованы характерные особенности самоорганизации диблок-сополимеров с разветвленным и линейным блоками. Определены области существования везикул амфифильных сополимеров в пространстве параметров качества растворителя, размера боковых цепей и их плотности пришивки, объемные доли блоков полимера и его концентрации. Также построены диаграммы состояний растворов с использованием методов активного обучения [3].

Показано, что разработанная методология оптимизации позволяет существенно ускорить поиск желаемых морфологий агрегатов амфифильных гребнеобразных сополимеров и обладает достаточной универсальностью для применения к макромолекулам различных классов. Разработанные вероятностные модели применены к задаче подбора архитектурных и молекулярных параметров полимеров, самоорганизация которых приводит к формированию мембранных структур (везикул).

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-73-20104-П. Моделирование проводилось на оборудовании Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.*

**Литература**

1. Pavlenko S.A., Larin D.E., Govorun E.N. Self-assembly of hydrophobic–amphiphilic diblock copolymers in solution // J. Phys.: Condens. Matter. 2022. Vol. 34.

2. Groot R.D., Warren P.B. Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation // J. Chem. Phys. 1997. Vol. 107. P. 4423.

3. Chengyu Dai, Glotzer S.C. Efficient Phase Diagram Sampling by Active Learning // J. Phys. Chem. B. 2020. Vol. 124, 7. P. 1275–1284.