**Компьютерное моделирование амфифильных полых микрогелей на межфазной границе**

Кудряшова С.С. 1, Гумеров Р.А. 1

*Студент, 4 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*

*физический факультет, Москва, Россия*

*E–mail:* *Sofia.Kudryashova@gmail.com*

Микрогели представляют собой мягкие, сшитые коллоидные сетки, которые демонстрируют уникальное поведение, в том числе на границе раздела двух несмешивающихся жидкостей (типа вода-масло). Оказавшись на такой границе, микрогели претерпевают сильные деформации и уплощение. При этом степень деформации зависит как от химического состава сетки, так и от ее архитектуры. Например, наличие твердого ядра приведет к уменьшению деформаций за счет армирующего действия ядра, а наличие полости, наоборот, увеличит степень деформации по сравнению со сплошными микрогелями с аналогичной долей сшивателя. В свою очередь, изменение плотности сшивки также влияет на деформацию на границе [1]. В случае амфифильных микрогелей, содержащих как гидрофильные, так и гидрофобные группы, случайным образом распределенные по сетке (субцепи являются статистическим сополимером), может наблюдаться смешение двух несмешивающихся жидкостей внутри микрогеля при его адсорбции на границу раздела [2].

В настоящей работе рассматривались амфифильные полые микрогели на межфазной границе двух жидкостей. Для моделирования структуры одиночных микрогелей использовалась диссипативная динамика частиц (ДДЧ). Было показано, что в отличие от сплошных амфифильных микрогелей, в полых частицах на границе раздела в полости будет присутствовать только один тип жидкости, если доля гидрофобных и гидрофильных звеньев совпадает. Этот тип будет зависеть от того из какой жидкости произошла адсорбция – вода, если частица адсорбируется из водной фазы и наоборот. Таким образом, был продемонстрирован эффект «памяти» об условиях адсорбции. Кроме того, было показано, что внутри оболочки микрогеля наблюдается перемешивание несмешиваемых жидкостей. В то же время, улучшение совместимости между сегментами микрогеля разных типов приводило к «схлопыванию» полости независимо от ее размера по крайней мере для тех значений параметров, которые рассматривались в моделировании. Наконец, было также изучено влияние композиции (доли гидрофобных звеньев) и степени совместимости гидрофильных сегментов с органической фазой.

*Работа выполнена под научным руководством профессора кафедры физики полимеров и кристаллов Потемкина И.И. и при поддержке гранта РНФ № 21-73-30013. Моделирование проводилось на суперкомпьютере Ломоносов 2 суперкомпьютерного комплекса Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.*

**Литература**

1. Karen Geisel, Andrey A. Rudov, Igor I. Potemkin, and Walter Richtering, Hollow and Core−Shell Microgels at Oil−Water Interfaces: Spreading of Soft Particles Reduces the Compressibility of the Monolayer liquids // Langmuir 2015, 31, 13145-13154.

2. Rustam A. Gumerov, Sergei A. Filippov, Walter Richtering, Andrij Pich and Igor I. Potemkin, Amphiphilic microgels adsorbed at oil–water interfaces as mixers of two immiscible liquids // Soft Matter 2019, 15, 3978-3986