**Изучение поглощения гостевых молекул амфифильными микрогелями с гидрофобными макромономерами методом компьютерного моделирования**

***Бушуев Н.В.1, Гумеров Р.А.1, Анахов М.В.1***

*Аспирант, 3 год обучения*

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

*физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* [*bushuev@polly.phys.msu.ru*](mailto:bushuev@polly.phys.msu.ru)

Микрогели – макромолекулярные сетки размером от десятков нанометров до нескольких микрон. Благодаря своей пористой структуре, микрогели способны поглощать низкомолекулярные вещества и набухать в растворителях. Помимо этого, обладая высокой поверхностной активностью, они являются перспективными кандидатами для стабилизации мелкодисперсных эмульсий. Кроме того, известно, что микрогели в двухкомпонентном растворителе, в котором доля одной из жидкостей мала (например, органический растворитель в водной среде, для удобства, будем далее называть эту жидкость маслом) способны поглощать и удерживать её капли [1]. Однако на сегодняшний день малоизученным остается вопрос, как будут вести себя в схожей ситуации микрогели более сложной архитектуры [2] (например, при наличии гидрофобных пришивок к гидрофильной полимерной сетке). Более того, рассмотрение случая амфифильной сетки позволит рассмотреть более широкий класс веществ, которые могут абсорбировать полимерные микрогели.

В данной работе методом диссипативной динамики частиц (ДДЧ) были изучены микрогели в двухкомпонентном растворителе, состоящим из минорной фазы «масла» и мажорной фазы «воды». Рассматривались микрогели, состоящие из гидрофильной сетки с гидрофобными пришивками. В реальности подобные полимерные частицы могут быть получены, например, путем сополимеризации гидрофильных или термочувствительных мономеров и гидрофобных макромономеров методом дисперсионной полимеризации. Было изучено влияние плотности сшивки гидрофильной сетки на изменение морфологии микрогеля по мере увеличения доли «масла» в системе и на вместимость микрогеля. Также было изучено как меняется морфология и вместимость частиц при изменении структуры и числа гидрофобных пришивок. В результате было установлено, что при меньшей плотности сшивки вместимость микрогеля оказывается существенно больше при одинаковой структуре гидрофобных пришивок. Также по мере заполнения микрогеля маслом происходит переориентация гидрофобных доменов, которая тем не менее не влияет на общую форму микрогеля. Кроме того, даже относительно небольшая добавленная доля гидрофобных пришивок, в сравнении с её отсутствием, позволяет микрогелю поглощать гостевые молекулы, поскольку гомополимерная сетка абсорбирует минорную фазу только при условии одинаково хорошей совместимости полимера с обеими жидкостями.

*Благодарность*: Работа выполнена под научным руководством проф., д.ф.-м.н. Потёмкина И.И. и при поддержке гранта РНФ № 24-43-10004. Моделирование проводилось на оборудовании Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

**Литература**

1. Mikhail V. Anakhov et. al. Scavenging One of the Liquids versus Emulsion Stabilization by Microgels in a Mixture of Two Immiscible Liquids // ACS Macro Letters 2020 *9* (5), 736-742.

2. Catalina Biglione et. al. Amphiphilic micro- and nanogels: Combining properties from internal hydrogel networks, solid particles, and micellar aggregates // Journal of Polymer Science 2021 Vol. 59, P. 2665 - 2703.