**Симметрийная классификация бислойных структур**

**амфифильных гомополимеров, привитых к сферической наночастице.**

***Митьковский Д.А.1,2***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия*

*2Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова РАН,*

*Москва, Россия*

*E–mail:* [d.mitkovskiy@yandex.ru](mailto:d.mitkovskiy@yandex.ru)

Использование сферических наночастиц с привитыми к поверхности полимерными цепями является эффективным подходом для получения функциональных материалов с заданными свойствами. Поскольку морфология поверхности наночастицы может быть настроена с помощью вариации широкого ряда параметров, таких как плотность и расположение точек пришивки, степень полимеризации и архитектура привитых макромолекул, а также качество растворителя и температура, они оказываются востребованными во многих областях науки и промышленности [1, 2].

Особый интерес представляют привитые к сферической наночастицы амфифильные гомополимеры, поведение которых может исследоваться в рамках молекулярной динамики. В огрубленном моделировании амфифильные мономерные единицы представлены “гантелями” A–*graft*–B, состоящими из двух бусин одинокого диаметра, при этом бусины А образуют основную цепь, а бусины B представляют собой свободно вращающиеся боковые подвески. Для таких систем было показано, что в случае, когда растворитель является хорошим для основной цепи и плохим для пендантных групп, макромолекулы собираются в мембраноподобные бислои, которые могут быть аппроксимированы полными вложенными минимальными поверхностями [3]. Важно отметить, что данный тип упорядочения полимерных структур выявлен впервые и позволяет классифицировать структуры по симметрии, подобно классификации кристаллов по федоровским группам.

В данной работе проведены компьютерные симуляции представленных систем с количеством цепей в интервале от 30 до 90 и длинами цепей в интервале от 12 до 36.   
На основе полученных результатов была обучена сверточная нейронная сеть, которая успешно применялась для классификации конфигураций. Также были построены диаграммы состояний и тепловые карты, отражающие количество структур при различных параметрах, что позволило более глубоко понять вариативность системы и выделить основные закономерности в её поведении.

*Автор выражает благодарность научным руководителям к.ф.-м.н. Лазутину А.А. и д.ф.-м.н., проф. Василевской В.В., а также д.ф.-м.н. А.Л. Талису и д.ф.-м.н. А.С. Ушаковой за плодотворные дискуссии. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 19-73-20104-П). В работе использованы вычислительные ресурсы Суперкомпьютерного центра МГУ имени М.В.Ломоносова.*

**Литература**

1. Lobling T.I., Haataja J.S., Synatschke C.V., et. al. Hidden Structural Features of Multicompartment Micelles Revealed by Cryogenic Transmission Electron Tomography // ASC Nano 2014. Vol. 8, P. 11330–11340.

2. Yan J., Bockstaller M. R., Matyjaszewski K. Brush-modified materials: Control of molecular architecture,assembly behavior, properties and applications // Progress in Polymer Science 2020. Vol. 100. P. 101180.

3. Mitkovskiy D.A., Lazutin A.A., Ushakova A.S., et. al. Geometric Features of Structuring of Amphiphilic Macromolecules on the Surface of a Spherical Nanoparticle // Polymer Science - Series C 2023. Vol 65. No. 1. P. 3–10.