**Молекулярно–динамическое моделирование процессов растворения поли–N–изопропилакриламида в воде**

***Рубцов Д.А.1, Зубанова Е.М.1, Тимашев П.С.1,2***

*Студент, 4 курс специалитета*

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

*химический факультет, Москва, Россия*

*2Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова, Научно-технический парк биомедицины*

*E–mail: dmitrii.rubtsov@chemistry.msu.ru*

Термочувствительные полимеры — полимеры, резко меняющие свои физико–химические свойства, чаще всего растворимость, при изменении температуры. Наиболее распространены полимеры с нижней критической температурой растворения (НКТР). Такие полимеры растворимы в полярных жидкостях, а при нагревании претерпевают фазовый переход «клубок–глобула»: при повышении температуры гидрофильные клубки частично дегидратируются и сворачиваются в полимерные глобулы. Одним из таких полимеров является поли–N–изопропилакриламид (ПНИПАМ) [1]. Одно из таких применений термочувствительных полимеров — это полимерные покрытия для получения клеточных структур. В этом случае при температурах выше НКТР клетки прилипают к поверхности полимера и размножаются. При понижении температуры полимерное покрытие растворяется, и клетки отходят без внешнего взаимодействия. Таким образом, процесс открепления клеток определяется растворением полимера [2].

В настоящем докладе обсуждается молекулярно–динамическое моделирование процессов растворения поли–N–изопропилакриламида в воде. Подходы молекулярной динамики активно применяются для моделирования поведения термочувствительных полимеров в воде, в основном для моделирования перехода клубок–глобула при повышении температуры [3]. Однако работ по моделированию растворения термочувствительных полимеров в воде, сопровождающемуся переходом глобула–клубок, мало, хотя именно этот переход определяет процесс открепления клеточных структур. В нашей работе в качестве моделей были выбраны молекулы ПНИПАМ длиной 20 звеньев и 50 звеньев и система, включающая две молекулы ПНИПАМ длиной 20 звеньев. Молекулярно–динамическое моделирование было проведено с использованием реакционных силовых полей (ReaxFF), разработанных для растворов белков. На первом этапе было проведено моделирование изолированных молекул ПНИПАМ в ансамбле NVT при 298 K и ячейки воды в ансамбле NPT при 298 K. Полученные конформации были объединены, после чего проводили моделирование растворения ПНИПАМ в воде в ансамбле NPT при температурах ниже и выше НКТР. Для контроля изменения конформации полимерной цепи рассчитывали радиусы инерции молекулы ПНИПАМ. Показано, что при температуре ниже НКТР (298 К) молекула ПНИПАМ переходит из глобулярной конформации в линейную клубкообразную, что сопровождается увеличением радиуса инерции молекулы полимера с 9 до 23 Å в течение 15 нс.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24–23–00196) и c использованием ресурсов вычислительного кластера Научно–технологического парка биомедицины Первого МГМУ им. И.М. Сеченова.*

**Литература**

1. Lanzalaco S., Armelin E. Poly(N-isopropylacrylamide) and Copolymers: A Review on Recent Progresses in Biomedical Applications // Gels. 2017. Vol. 3, № 4. P. 36.

2. Ward M.A., Georgiou T.K. Thermoresponsive Polymers for Biomedical Applications // Polymers (Basel). 2011. Vol. 3, № 3. P. 1215–1242.

3. Alaghemandi M., Spohr E. Molecular Dynamics Investigation of the Thermo‐Responsive Polymer Poly(N‐isopropylacrylamide) // Macromol Theory Simul. 2012. Vol. 21, № 2. P. 106–112.