

## ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В СИНТЕЗЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ИМПРИНТИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРОВ

Рогачев С.С., Карасева Н.А.

*ФГБОУ ВО «Липецкий государственный технический университет», 398600, Липецк, Московская 30,  
e-mail: onetwookcufyrfyrol@gmail.com*

Предсказание термодинамических характеристик для известных и предполагаемых молекул с использованием квантово-механических расчетов в настоящее время является одним из важных и быстроразвивающихся методов исследований. Главная ценность методов компьютерного моделирования - это возможность предсказание свойств неизвестных соединений, синтез которых требует больших затрат времени и материальных ресурсов исследователей

Компьютерное моделирование с применением вычислительных методов позволяет произвести расчеты, связанные с изучением свойств различных соединений, в том числе молекулярно-импринтированных полимеров. Возможности компьютерного моделирования для дизайна молекулярно-импринтированных полимеров весьма существенны: подбор функционального мономера, расчет молярного соотношения (функциональный мономер: темплата функциональный мономер: кросс мономер) и оценка влияния порогенного растворителя [1].

Применение вычислительного метода компьютерного моделирования, в частности метода Хартри-Фока для оптимизации процесса синтеза молекулярно-импринтированного цефотаксимом полимера, позволило выбрать оптимальный функциональный мономер (метакриловая кислота), рассчитать оптимальное соотношение между цефотаксимом и метакриловой кислотой, равное 1:4, подобрать оптимальный кросс-мономер (этиленгликольдиметакрилат) и определить порогенный растворитель.

Использование компьютерного моделирования значительно сократило время для выбора составляющих синтеза и его оптимизации.

### Литература

1. Mehdi Tabandeh , Computational design and synthesis of molecular imprinted polymers for selective extraction of allopurinol from human plasma 2012 P 24-31

*Работа выполнена в рамках внутреннего гранта ФГБОУ ВО «Липецкий государственный технический университета*