

Всероссийская конференция



ПОЛИМЕРЫ ²⁰²⁵ и композиты на их основе

КАЗАНЬ

прикладные и экологические решения

Казань, 21–24 апреля 2025 года



ТЕЗИСЫ
ДОКЛАДОВ



КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ

Секция:

Физико-математическая

К-23 КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАКРОМОЛЕКУЛ: ОТ ДЕТАЛЕЙ СТРОЕНИЯ ДО МАКРОСКОПИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Василевская В. В.,

Лазутин А. А., Гусева Д. В., Глаголева А. А., Буглаков А. И.

*Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова Российской
Академии Наук
119991, Россия, г. Москва, ул. Вавилова, д. 28.*

В докладе на примере нескольких практически значимых систем будут показаны возможности методов компьютерного эксперимента как инструмента, способного имитировать сложные полимерные системы, анализировать детали строения на масштабах, недоступных экспериментальным методам, и прогнозировать их макроскопические свойства.

Будет рассмотрен *in silico* синтез сверхсшитого полистирола, проанализированы особенности смешения полилактидов разного энантиомерного состава, выделена область с максимальной проводимостью в сополимерах, содержащих блоки с высокой литий-ионной проводимостью, описана самосборка надмолекулярных фибриллярных гелей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lazutin A. A., Glagolev M. K., Vasilevskaya V. V., Khokhlov A. R. Hypercrosslinked polystyrene networks: an atomistic molecular dynamics simulation combined with a mapping/reverse mapping procedure. *J. Chem. Phys.*, **2014**, *140*, 134903(1-8)
2. Lazutin A. A., Glagoleva A. A., Vasilevskaya V. V., Khokhlov A. R. Computer synthesis of hypercrosslinked polystyrene: All-atom simulations. *Low Temperature Physics* **2017**, *43*, 244-247.
3. Guseva D. V., Lazutin A. A., Vasilevskaya V. V. Atomistic simulation of amorphous poly (lactic acid) blends: stereodependent miscibility and properties. *Macromolecules* **2024**, *57*, 11276–11288.
4. Guseva D. V., Glagolev M. K., Lazutin A. A., Vasilevskaya V. V. Revealing structural and physical properties of polylactide: what simulation can do beyond the experimental methods. *Polymer Reviews* **2024**, *64*, 80–118.
5. Vasilevskaya V. V., Lozinskaya E. I., Ponkratov D. O., Lazutin A. A., Buglakov A. I., Grysan P., Shaplov A. S. From computer simulation to synthesis of highly lithium-ion conductive block copolymers with bicontinuous morphology. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2025 (submitted)
6. Buglakov A. I., Vasilevskaya V. V. Self-assembled graft-copolymers nanofibers with adjustable internal and external structure. *Macromolecules* **2023**, *56*, 6600–6608.

Работа выполнена в рамках Государственного задания №075-00276-25-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации с использованием оборудования Межлабораторного вычислительного центра Института элементоорганических соединений им А.Н. Несмеянова РАН.