



**МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН ПО ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫМ СОЕДИНЕНИЯМ
ИНСТИТУТ СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ
им. Н.С.Ениколопова РАН
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
им. Н.Н.Семенова РАН**

XXXIII ЕНИКОЛОПОВСКИЕ ЧТЕНИЯ

Москва, 13 марта 2025 г.

Чтения состоятся 13 марта 2025 г., начало в 11:00 в конференц-зале
Института синтетических полимерных материалов
им. Н.С.Ениколопова РАН

Адрес Института: Москва, ул. Профсоюзная, 70

Проезд: Станция метро "Новые Черемушки", автобусы 1, 41, 196 -
остановка - "Институт полимерных материалов"

Телефон для справок в ИСПМ им. Н.С.Ениколопова РАН:

(495) 335-9100

(495) 332-5827



ПРОГРАММА

11.00

Лебедев Олег Владимирович, к.ф.-м.н., Ph.D. MS&E, с.н.с.
Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова РАН

Многомасштабное моделирование как способ предсказания структуры и свойств конечных изделий на основе полимерных композиционных материалов

Тематика многомасштабного моделирования материалов в последние десятилетия характеризуется чрезвычайно высоким темпом развития, обусловленным значительным прогрессом как в области вычислительных методов, так и производительности вычислительной техники. Основными потребителями результатов такого рода численного моделирования являются производители изделий и конструкций со строгими требованиями к их эксплуатационным характеристикам. Подобны интерес вызван значительными временными и денежными затратами на производство и экспериментальные испытания конечных изделий. В то же время в производстве наблюдается сильный рост интереса к использованию полимерных композиционных материалов, зачастую обладающих превосходящим комплексом характеристик, по сравнению, например, с металлами или неармированными полимерами. К сожалению, для этих материалов из-за специфики полимеров и их переработки полный цикл многомасштабного моделирования – от атомарного уровня до уровня непосредственно изделий и конструкций – зачастую не позволяет достоверно получать результаты, с требуемой точностью соответствующие экспериментальным данным. В докладе пойдет речь о подходах к численному многомасштабному моделированию процессов получения полимерных композиционных материалов для конкретных практических применений. Эти подходы должны учитывать физические свойства и зависимости этих свойств от времени/условий для отдельных компонент композитов, а также деталей, выполненных из них. Будет обсуждаться необходимость проведения экспериментальных исследований, как для верификации результатов численного моделирования, так и для использования экспериментальных данных в качестве входных при моделировании.

11.40

Потапкин Борис Васильевич, к.ф.-м.н.
НИЦ «Курчатовский институт», ООО «Кинтех Лаб», Москва, Россия

Предсказание свойств полимерных материалов и композитов с использованием программного пакета MULTICOM

Рассмотрены современные методы предсказания физико-химических свойств полимерных материалов и полимерных нанокомпозитов в рамках многоуровневого подхода, основанного на атомистическом моделировании из первых принципов. Представлен программный пакет MULTICOM, сочетающий в себе моделирование на атомистическом (QC, MD), мезоскопическом (Coarse Grained models: MD, DPD, MC ...) и макроуровне уровнях (FE) и позволяющий выполнять расчеты на удаленных высокопроизводительных вычислительных системах. Приведены примеры успешного использования методов многоуровневого моделирования для расчета структуры полимерных материалов и композитов, их механических, барьерных и других физических свойств.

Перерыв 12.20 - 13.00

13.00

Василевская Валентина Владимировна, д.ф.-м.н., зав.лаб.
Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН Москва, Россия

Внутри- и межмолекулярная самоорганизация амфифильных гомополимеров : компьютерное моделирование

Амфифильные гомополимеры — это макромолекулы, все или часть мономерных звеньев которых включает как гидрофобные, так и гидрофильные группы. Амфифильные мономеры обладают удивительной способностью к самоорганизации, повторяют практически все структуры, которые можно наблюдать в растворах низкомолекулярных поверхностно-активных веществ, и образуют ряд дополнительных. В докладе будут представлена простейшая мезоскопическая модель таких макромолекул и рассмотрены сложные эффекты, которые были описаны с ее помощью. Мы обсудим преимущества и недостатки использования огрубленных моделей, расскажем о нашем опыте применения методов активного обучения для анализа морфологических состояний полимерных систем.

13.40

Дубинец Никита Олегович, к.ф.-м.н., н.с.
Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, НИЦ «Курчатовский институт», МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках

Органические светодиоды, являющиеся наиболее популярными устройствами среди органических полупроводников, служат основой для (микро)дисплеев и других устройств визуального вывода информации. Их достоинствами выступают высокая яркость, контраст и чистота цвета, а также низкое энергопотребление. Предсказательное теоретическое моделирование позволяет существенно ускорить и облегчить дизайн новых эффективных соединений, применяемых в данных устройствах. В докладе будет представлен многомасштабный подход для расчёта структурных, энергетических и оптических свойств различных светоизлучающих материалов, использующихся в органической оптоэлектронике, показаны возможности его применения и точность получаемых результатов.