

РАЗРАБОТКА ПОЛИМЕРНЫХ ТЕРМОПЛАСТИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ: ОТ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДО ВНЕДРЕНИЯ

Люлин С.В.

ИВС РАН, Санкт-Петербург, Большой пр. 31

E-mail: s.v.lyulin@gmail.com

Современное компьютерное моделирование на микросекундном масштабе времен с использованием моделей атомистического разрешения демонстрирует высокую эффективность для виртуального дизайна новых термопластичных макромолекул, предваряющего химический синтез. Последние теоретические работы в данной области помогли не только объяснить различие физических свойств близких по химической структуре перспективных полиимидов, синтезированных в ИВС РАН, но и синтезировать ряд новых полиимидов с характеристиками, предсказанными результатами проведенного моделирования. Разработанная методика исследования успешно применена и к термопластичным биополимерам медицинского назначения.