

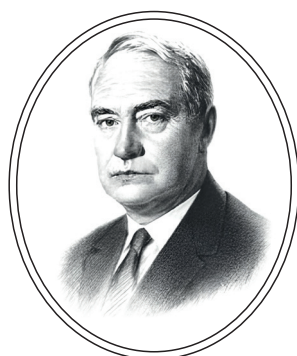
СБОРНИК ТЕЗИСОВ



ДЕВЯТАЯ ВСЕРОССИЙСКАЯ КАРГИНСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «ПОЛИМЕРЫ — 2024»

1-3 ИЮЛЯ 2024 ГОДА

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН ПО ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫМ
СОЕДИНЕНИЯМ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА



**ДЕВЯТАЯ ВСЕРОССИЙСКАЯ
КАРГИНСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«ПОЛИМЕРЫ – 2024»**

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Москва, Россия
1-3 июля 2024 года

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

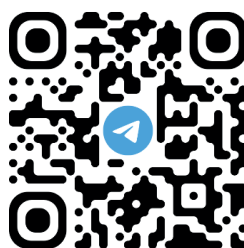
Хохлов А.Р. – председатель
Кожунова Е.Ю. – ученый секретарь

Авдеев В.В.	Куличихин В.Г.
Алдошин С.М.	Кучин А.В.
Анаников В.П.	Максимов А.Л.
Берлин А.А.	Музафаров А.М.
Братская С.Ю.	Новаков И.А.
Бузник В.М.	Сергеев В.Г.
Гришин Д.Ф.	Федин В.П.
Карлов С.С.	Федюшкин И.Л.
Калмыков С.Н.	Чвалун С.Н.
Койфман О.И.	Черникова Е.В.
Комлев В.С.	Щипунов Ю.А.

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Ярославов А.А. – председатель

Бадамшина Э.Р.	Пономаренко С.А.
Галлямов М.О.	Потемкин И.И.
Заремский М.Ю.	Серенко О.А.
Зезин А.А.	Трофимчук Е.С.
Люлин С.В.	Якиманский А.В.
Озерин А.Н.	



ISBN 978-5-6052004-1-3



9 785605 200413 >

КОНФЕРЕНЦИЯ ПРОВОДИТСЯ ПРИ ПАРТНЕРСТВЕ
И ФИНАНСОВОЙ ПОДДЕРЖКЕ

СИБУР
ПОЛИЛАБ



ИТЕКМА

ИНФРА·М

издательский холдинг

ПРИ ТЕХНИЧЕСКОЙ
ПОДДЕРЖКЕ



mesol

ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЙ
ОПЕРАТОР КОНГРЕССОВ

УДК 544.7

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В РЕДОСК-АКТИВНЫХ МИКРОГЕЛЯХ

Самodelкин Р.А.^{1,3}, Сергеев А.В.^{2,3}, Рудяк В.Ю.³, Кожунова Е.Ю.³,
Чертович А.В.^{2,3}, Хохлов А.Р.³

¹ ФФФХИ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119991, Россия

² ФИЦ ХФ им. Семенова, Москва, 119991, Россия

³ Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119991, Россия

E-mail: samodelkinatl@mail.ru

Полимерные микрогели, модифицированные редокс-активными функциональными группами (к примеру, ТЕМПО) являются перспективным материалом для новых проточных аккумуляторов. В отличие от растворов линейных полимеров, сшитые полимерные системы позволяют добиться существенно большей концентрации редокс-групп без эффекта запутывания полимерных цепочек, приводящего к критическому повышению вязкости раствора. Из-за того, что лишь функциональные группы на поверхности микрогеля могут непосредственно контактировать с электродом, встаёт вопрос об эффективности использования внутреннего объёма крупных частиц микрогеля. Этот показатель ограничивается скоростью переноса заряда в ядре микрогеля.

В рамках данной работы методами огрублённой молекулярной динамики были смоделированы микрогели и объём сшитой полимерной сетки, представляющей ядро микрогеля. Произведена оценка подвижности функциональных групп и скорости переноса заряда между группами в зависимости от степени сшивки и качества растворителя. На основании анализа процесса диффузии заряда в объёме микрогеля были сделаны оценки характерного времени, необходимого для полного заряда/разряда частицы микрогеля при контакте с электродом. Результаты позволили выдвинуть рекомендации по оптимизации параметров микрогелей для применения в проточных аккумуляторах.

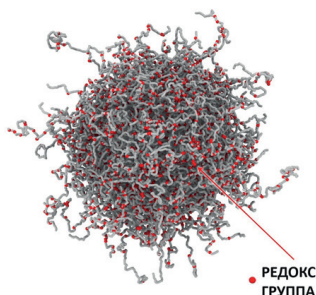


Рисунок 1. Характерный вид полимерного микрогеля с редокс-активными функциональными группами (обозначены красным).

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 22-13-00115.