



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):
2025615973

Дата регистрации: 12.03.2025

Номер и дата поступления заявки:
2025614080 28.02.2025

Дата публикации и номер бюллетеня:
12.03.2025 Бюл. № 3

Автор(ы):

Александров Евгений Викторович (RU),
Павлов Александр Александрович (RU),
Кольцов Александр Юрьевич (RU),
Кривошапов Николай Владиславович (RU)

Правообладатель(и):

федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
образования «Московский государственный
технический университет имени Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский
университет)» (RU)

Название программы для ЭВМ:

Модуль расчета температуры стеклования полиэфирсульфонов

Реферат:

Программа реализует методику определения температуры стеклования полиэфирсульфона на основании данных о его структуре, заданных в форматах SMILES+SMARTS, степени полимеризации и количестве блоков. Методика основана на проведении серии расчетов методами молекулярной динамики в программе LAMMPS, имитирующих процесс стеклования полимера, с последующим определением точки перехода в стеклообразное состояние. Тип ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК; ОС: Windows 10, Ubuntu 24.04.

Язык программирования: Python

Объем программы для ЭВМ: 10 КБ