

## Προτυποποίηση, σε διάφορες κλίμακες μήκους και χρόνου, νανοσύνθετων υλικών πολυμερικής μήτρας

Δώρος Ν. Θεοδώρου

Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ηρώων Πολυτεχνείου 9, Πολυτεχνειούπολη Ζωγράφου, 157 80 Αθήνα, [doros@central.ntua.gr](mailto:doros@central.ntua.gr)

Η διασπορά νανοσωματιδίων μέσα σε πολυμερικές μήτρες μπορεί να αποτελέσει βάση για την ανάπτυξη υλικών με νέες ιδιότητες. Ακόμη, όμως, δεν έχει κατανοηθεί πλήρως πώς οι ιδιότητες αυτές εξαρτώνται από τα μοριακά χαρακτηριστικά. Η μαθηματική προτυποποίηση και προσομοίωση υπόσχονται πολλά ως μέσα πρόβλεψης των σχέσεων δομής – ιδιοτήτων, αλλά αντιμετωπίζουν σοβαρές προκλήσεις, καθώς η δομή και η δυναμική στα νανοσύνθετα πολυμερικής μήτρας διέπονται από ευρύτατες κλίμακες μηκών και χρόνων.

Στην ομιλία αυτή θα σκιαγραφήσουμε μια ιεραρχική στρατηγική για την πρόβλεψη της δομής, των θερμομηχανικών και ρεολογικών ιδιοτήτων υλικών αποτελούμενων από νανοσωματίδια σφαιρικού σχήματος διεσπαρμένα μέσα σε άμορφα πολυμερή. Η στρατηγική αυτή περιλαμβάνει (α) λεπτομερείς προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής (MD) [1], (β) αδροποιημένες προσομοιώσεις Monte Carlo (MC) μεταβλητής συνδετικότητας, στις οποίες κάθε επαναλαμβανόμενη μονάδα του πολυμερούς αναπαρίσταται ως ένα κέντρο αλληλεπίδρασης [1], (γ) προσομοιώσεις Monte Carlo εμπνευσμένες από τη θεωρία πεδίου (FTiMC), που χειρίζονται τις αλυσίδες ως αλληλουχίες στατιστικών τμημάτων Kuhn [2], (δ) προσομοιώσεις δυναμικής Brown/κινητικής Monte Carlo (BD/kMC), όπου οι αλυσίδες ανάγονται σε σειρές από σφαίρες 5-10 τμημάτων Kuhn συνδεδεμένες μεταξύ τους με ελατήρια και οι διαπλοκές σε ελατήρια ικανά να ολισθαίνουν κατά μήκος των αλυσίδων. Κάθε επίπεδο αναπαράστασης επικαλείται παραμέτρους που εξάγονται από τα λεπτομερέστερα επίπεδα, έτσι ώστε τελικά όλες οι προβλέψεις βασίζονται σε ένα ατομιστικό πεδίο δυνάμεων.

Με τα υπολογιστικά αυτά εργαλεία διερευνούμε (i) πώς οι διαμορφώσεις, οι μοριακές κινήσεις και το σημείο υαλώδους μετάπτωσης του ατακτικού πολυστυρενίου επηρεάζονται από τη διασπορά φουλερενίων μέσα σ' αυτό, (ii) πώς η δομή και οι διαστάσεις της στεφάνης αλυσίδων πολυστυρενίου προσδεδεμένων κατά το ένα άκρο στην επιφάνεια νανοσωματιδίου πυριτίας για να προαγάγουν τη διασπορά του μέσα σε τήγμα πολυστυρενίου εξαρτώνται από το μοριακό βάρος και την επιφανειακή πυκνότητα πρόσδεσης, (iii) πώς το μέτρο χαλάρωσης τάσεων, που ποσοτικοποιεί τη γραμμική ιξωδοελαστικότητα τμημάτων cis-1,4 πολυϊσοπρενίου, επηρεάζεται από τα μοριακά τους χαρακτηριστικά.

[1] Vogiatzis, G.G.; Theodorou, D.N. *Macromolecules* **2014**, *47*, 387-404.

[2] Vogiatzis, G.G.; Theodorou, D.N. *Macromolecules* **2013**, *46*, 4670-4683.