

Μία γενικευμένη καταστατική εξίσωση για τη περιγραφή της ρεολογικής συμπεριφοράς πολυμερικών τμημάτων βασισμένη στις αρχές της εκτός ισορροπίας θερμοδυναμικής

Παύλος Σ. Στεφάνου

*Τμήμα Μαθηματικών και Στατιστικής, Πανεπιστήμιο Κύπρου, Ταχ.Κυβ. 20537, 1678
Λευκωσία, Κύπρος
Επικοινωνία: stephanou.pavlos@ucy.ac.cy*

Περίληψη

Αναμφισβήτητα, τα πολυμερή (ή μακρομόρια ή πλαστικά) σήμερα έχουν καταλάβει σημαντική θέση στη καθημερινότητα μας. Από τα στυλό, στη κουζίνα και στα αυτοκίνητα μέχρι τα αεροπλάνα και τους δορυφόρους η παραγωγή πλαστικού σήμερα έχει πλέον ξεπεράσει αυτή του χάλυβα. Καθίσταται λοιπόν επιτακτική η ανάγκη μοντελοποίησης των πολυμερικών συστημάτων. Κάτι τέτοιο θα μας καταστήσει ικανούς να σχεδιάσουμε νέα πολυμερικά υλικά με βελτιωμένες ιδιότητες. Σκοπός του σεμιναρίου αυτού, είναι να παρουσιάσει μία τέτοια προσπάθεια μοντελοποίησης που επί ουσίας αποτελεί και προσπάθεια μοντελοποίησης σε πολλαπλές κλίμακες μήκους και χρόνου.

Θα αναφερθούμε αρχικά για τον, όντως, συναρπαστικό κόσμο της μακρομοριακής ρεολογίας καθώς και για τις πάρα πολλές δυνατότητες δημιουργίας διάφορων αρχιτεκτονικών δομών των πολυμερών. Θα αναφερθούμε εν περιλήψει στη δυναμική των αλυσίδων εν ισορροπία όπου, ανάλογα με το μήκος τους, είτε συμπεριφέρονται ως αλυσίδες Rouse (ένα πρόβλημα που σχετικά εύκολα μπορεί να επιλυθεί) είτε λόγω του φαινομένου των διαπλοκών (ή εναγκαλισμών). Στην τελευταία περίπτωση, η δυναμική περιγραφή τους καθίσταται ιδιαίτερα δύσκολη και περίπλοκη. Όμως οι ιδέες των Edwards και de Gennes για τον σωλήνα μέσου πεδίου που περιβάλλει τις αλυσίδες και τη δυνατότητα της αλυσίδας να απεγκλωβιστεί από αυτόν με ερπυσμό, έχουν καταστήσει πλέον επιλύσιμο και το πρόβλημα δυναμικής των διαπλεγμένων πολυμερικών αλυσίδων.

Το μεγαλύτερο όμως κομμάτι της ομιλίας θα αναφέρεται στη προσπάθεια μοντελοποίησης των αδιάπλεκτων αλυσίδων εκτός ισορροπίας με τη χρήση του formalismού των Μπερή και Edwards. Θα αναφερθούμε στη εξαγωγή του γενικευμένου μοντέλου και όλα τα σημαντικά χαρακτηριστικά που εμπεριέχει. Εν συνεχεία, θα επιλύσουμε αρκετά απλοποιημένα μοντέλα και θα δείξουμε ότι οι προβλέψεις τους δεν μπορούν να περιγράψουν τη ρεολογική συμπεριφορά αδιάπλεκτων αλυσίδων πολυαιθυλενίου όπως έχουν προκύψει από προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής εκτός ισορροπίας (Non Equilibrium Molecular Dynamics). Το γενικευμένο όμως μοντέλο αποδεικνύεται ικανό να περιγράψει αρκετά καλά τα αποτελέσματα αυτών των προσομοιώσεων. Θα κλείσουμε το σεμινάριο παραθέτοντας πληροφορίες για την εξαγωγή ρεολογικών μοντέλων με χρήση του formalismού των Μπερή και Edwards και σε διαπλεγμένα πολυμερή και σε πιο πολύπλοκα συστήματα όπως πολυμερικά νανοσύνθετα (σωματίδια διαστάσεων νανομέτρου εμβαπτισμένα σε πολυμερική μήτρα).