

Ημερίδα  
**Μοντελοποίηση της ιξωδοελαστικότητας  
πολυμερικών νανοσύνθετων βασιζόμενοι στις αρχές  
της θερμοδυναμικής εκτός ισορροπίας**

**Δυναμική Νανοσυνθετων Πουμερικών Υλικών με Ιεραρχικές Μοριακές  
Προσομοιώσεις**

**Dynamics of Polymer Nanocomposites through Hierarchical Molecular  
Simulations**

**Vagelis Harmandaris**

*Department of Mathematics and Applied Mathematics, University of Crete  
Institute of Applied and Computational Mathematics, IACM/FORTH,  
71110 Heraklion, Greece*

Τα πολυμερικά νανοσύνθετα υλικά αποτελούν μια πολύ ενεργή ερευνητική περιοχή λόγω του μεγάλου εύρους των τεχνολογικών τους εφαρμογών. Σημαντική πρόκληση στη μελέτη τέτοιων υλικών είναι η σύνδεση της δομής τους σε μοριακό επίπεδο με μεσοσκοπικές δομές και μακροσκοπικές ιδιότητές τους. Εδώ θα παρουσιάσουμε αποτελέσματα από ιεραρχικές μοριακές προσομοιώσεις πολυμερικών νανοσύνθετων υλικών. Οι προσομοιώσεις αυτές συνδυάζουν πληροοφορίες από διαφορετικές κλίμακες χαρακτηριστικών μηκών και χρόνων.<sup>1-6</sup>

Πιο συγκεκριμένα προβλέπουμε ιδιότητες δομής, όπως είναι το προφίλ της πυκνότητας στη διεπιφάνεια πολυμερούς/στερεού και ο παράγοντας δομής. Κατόπιν εξετάσαμε τη δυναμική αυτών των συστημάτων υπολογίζοντας χαρακτηριστικούς χρόνους χαλάρωσης σε μοριακό επίπεδο. Επίσης εξαγάγουμε μακροσκοπικές ιδιότητες, όπως ο συντελεστής διάχυσης κατευθείαν από τη μοριακή δομή. Ως παράδειγμα μελετήσαμε τα παρακάτω υβριδικά νανοσύνθετα συστήματα: (α) πολυμερικά υλικά (πολυαιθυλένιο και πολυστυρένιο) με γραφένιο,<sup>2,5</sup> και (β) πολυμερή με μεταλλικές επιφάνειες (πολυστυρένιο/χρυσό).<sup>3,4,6</sup>

**References**

1. V. Harmandaris, "Quantitative study of equilibrium and non-equilibrium polymer dynamics through systematic hierarchical coarse-graining simulations", *Korea-Aust. Rheol. J.*, 2014, 26, 15-28.
2. A. Rissanou, V. Harmandaris, "Dynamics of various polymer/graphene interfacial systems through atomistic molecular dynamics simulations", *Soft Matter*, 2014, 10, 2876-2888.
3. K. Johnston, V. Harmandaris, "Hierarchical multiscale modeling of polymer–solid interfaces: Atomistic to coarse-grained description and structural and conformational properties of polystyrene–gold systems", *Macromolecules*, 2013, 46, 5741–5750.

4. K. Johnston, V. Harmandaris, "Hierarchical simulations of hybrid polymer/solid materials", *Soft Matter*, 2013, 9, 6696-6710 (Review article, Themed Issue on Emerging Investigators).
5. A. Rissanou, V. Harmandaris, "Structure and dynamics of poly(methyl-methacrylate)/graphene systems through Atomistic molecular dynamics Simulations", *Journal of Nanoparticle Research* 2013, 15, 1589.
6. K. Johnston, V. Harmandaris, "Properties of short polystyrene chains confined between two gold surfaces through a combined density functional theory and classical molecular dynamics approach", *Soft Matter*, 2012, 8, 6320-6332.