

PROPUESTA PARA AUXILIAR DE INVESTIGACIÓN

Nombre del NACT: División Polímeros Nanoestructurados (INTEMA)

Director del NACT: Cristina Hoppe

Tutor del auxiliar: Ezequiel Soulé

Proyecto de investigación en el que se enmarca la propuesta:

Proyecto UNMdP 15/G595: MATERIALES INTELIGENTES CON COMPONENTES ORGÁNICOS E INORGÁNICOS.

Modelado termodinámico del comportamiento de fases en copolímeros con un bloque cristalino.

Un copolímero en bloques (BCP) consiste en dos o más cadenas poliméricas diferentes unidas entre sí mediante un enlace covalente. Si los bloques son de diferente naturaleza química, o si se disuelven en un solvente selectivo, se produce una micro-separación de fases que da lugar a la formación de estructuras micelares. En el caso de que un bloque sea cristalizante, esto constituye una fuerza impulsora extra para la micro-separación de fases. El interés en estos materiales surge por la posibilidad de compatibilizar polímeros naturalmente inmiscibles, de encapsular o segregar preferencialmente otras sustancias, o utilizarlos como molde para el autoensamblado de otras especies, entre otras[1].

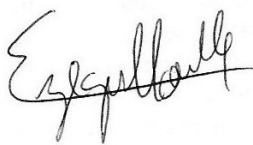
El tipo de estructura micelar que se forma depende de las características químicas y topológicas de los bloques del BCP, además de la selectividad del solvente y de la formación o no de fases moleculares ordenadas (bloques capaces de cristalizar o de formar fases líquido-cristalinas).[2] Si un bloque cristaliza, se preferirán geometrías planas (lamelas, cintas o discos) que minimicen la deformación del cristal[3].

Dentro del grupo se estudia la formación de fases micelares en sistemas de BCP con un bloque cristalizante, y se ha observado la formación de micelas con forma de cinta y de disco en diferentes condiciones[4]. En un trabajo previo del grupo[5] se desarrolló un modelo para un sistema de cadenas poliméricas injertadas en una superficie sólida impenetrable de tamaño finito. Este modelo sirve para representar la estructura de la corona de una micela con núcleo plano generada en el caso de un BCP con un bloque cristalizante. En este plan se propone, partiendo de este trabajo, plantear un modelo para un sistema micelar de un copolímero con un

bloque cristizable, considerando micelas con geometría de cinta y de disco. También se considerará un modelo análogo para micelas esféricas y cilíndricas para el caso en que no hay cristalización. A partir de la minimización de la energía libre de este modelo se calcularán los diagramas de fases, donde se representarán las condiciones de estabilidad de cada tipo de micela y la coexistencia macroscópica entre fases micelares si la hubiera, en función de los parámetros materiales del sistema. En una etapa posterior se podrá considerar la formación de fases ordenadas de micelas, por ejemplo fases nemáticas para el caso de micelas cinta o fases discóticas para micelas disco.

Referencias

- [1] D. Zschech, A. P. Milenin, R. Scholz, R. Hillebrand, Y. Sun, P. Uhlmann, M. Stamm, M. Steinhart, and U. Gösele, "Transfer of Sub-30-nm Patterns from Templates Based on Supramolecular Assemblies," *Macromolecules*, vol. 40, pp. 7752–7754, 2007.
- [2] T. P. Lodge, B. Pudil, and K. J. Hanley, "The Full Phase Behavior for Block Copolymers in Solvents of Varying Selectivity," *Macromolecules*, vol. 35, no. 12, pp. 4707–4717, 2002.
- [3] D. Richter, D. Schneiders, M. Monkenbusch, L. Willner, L. J. Fetters, J. S. Huang, M. Lin, K. Mortensen, and B. Farago, "Polymer Aggregates with Crystalline Cores : The System Polyethylene - Poly (ethylenepropylene)," *Macromolecules*, vol. 30, pp. 1053–1068, 1997.
- [4] I. A. Zucchi and W. F. Schroeder, "Nanoribbons with semicrystalline core dispersed in a visible-light photopolymerized epoxy network," *Polym. (United Kingdom)*, vol. 56, pp. 300–308, 2015.
- [5] A. S. Andreu Artola and E. R. Soulé, "Theory of polymer brushes grafted to finite surfaces," *J. Polym. Sci. Part B Polym. Phys.*, vol. 56, no. 8, pp. 663–673, 2018.



Firma del Tutor del Asistente



Firma del Director del NACT