

PROPUESTA PARA AUXILIAR DE INVESTIGACIÓN

Nombre del NACT: División Polímeros Nanoestructurados (INTEMA)

Director del NACT: Cristina Hoppe

Tutor del auxiliar: Ezequiel Soulé

Co-Tutor del auxiliar: Cristian Balbuena

Proyecto de investigación en el que se enmarca la propuesta:

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

Descripción de las tareas a realizar (máximo 1 página):

Simulación de nanocompuestos poliméricos mediante dinámica molecular.

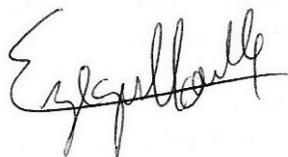
Cuando el tamaño de los materiales se reducen a la escala nanométrica, estos pueden mostrar propiedades muy diferentes a las que exhiben en una macroescala posibilitando aplicaciones interesantes con alto impacto tecnológico. Esta reducción de escala que se presenta en estos materiales pone en evidencia la importancia que tienen los efectos interfaciales en la perturbación de las propiedades macroscópicas. Por esta razón, uno de los principales desafíos teóricos que enfrenta la nanociencia es el lograr interpretar estos cambios en las propiedades en relación al comportamiento interfacial[1], [2].

En este marco, se planea estudiar el comportamiento dinámico y estructural de la matriz polimérica en las interfases de dos materiales poliméricos nanoestructurados paradigmáticos: nanocompuestos poliméricos formados por nanopartículas esféricas (NPs) y en películas delgadas, mediante simulaciones de dinámica molecular. El objetivo general es correlacionar los cambios en las propiedades macroscópicas de estos sistemas con el comportamiento molecular interfacial. Se prevé que este estudio permita avanzar en el conocimiento teórico de estos materiales de elevado interés en nanociencia y nanotecnología, proporcionando herramientas para el diseño racional de estos materiales.

Para las simulaciones se utilizará el programa de distribución libre y código abierto LAMMPS, provisto por Sandia National Laboratories. Se analizará el comportamiento dinámico y estructural de la matriz polimérica, en función de la distancia a las superficies, incluyendo correlaciones en un ensamble isoconfiguracional de modo de poder detectar correlaciones entre la estructura y el comportamiento dinámico (el detalle de este tipo de análisis puede encontrarse en trabajos previos[3], [4]). El análisis y procesamiento de resultados se efectuará mediante la combinación de programas de visualización de distribución libre existentes, o mediante la generación de códigos propios en programas de análisis matemático tipo Matlab.

Referencias

- [1] R. Shenhar, T. B. Norsten, and V. M. Rotello, "Polymer-Mediated Nanoparticle Assembly: Structural Control and Applications," *Adv. Mater.*, vol. 17, no. 6, pp. 657–669, Mar. 2005.
- [2] E. Roduner, "Size matters: why nanomaterials are different," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 35, no. 7, pp. 583–592, 2006.
- [3] C. Balbuena, M. M. Gianetti, and E. R. Soulé, "Static and dynamic correlation lengths in supercooled polymers," *J. Chem. Phys.*, vol. 150, no. 23, p. 234508, 2019.
- [4] C. Balbuena and E. Soule, "An alternative approach to evidence the structural conditioning in the dynamic slowdown in a polymer glass-former," *J. Phys. Condens. Matter*, 2019.



Firma del Tutor
del Asistente



Firma del Co-Tutor
del Asistente



Firma del Director
del NACT