

ΡΕΟΛΟΓΙΚΗ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑ ΥΔΑΤΙΚΩΝ ΔΙΑΛΥΜΑΤΩΝ ΔΙΑΠΛΕΓΜΕΝΩΝ ΜΙΚΥΛΛΙΩΝ
ΣΚΩΛΗΚΟΕΙΔΟΥΣ ΔΟΜΗΣ ΜΕΣΩ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΚΑΤΑ BROWN**Κ. Σ. Καραδήμα^{1,2}, Β. Γ. Μαυραντζάς^{1,2,3*}**¹ Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα, Ελλάδα² Ινστιτούτο Επιστημών Χημικής Μηχανικής, ΙΤΕ/ΙΕΧΜΗ, Πάτρα, Ελλάδα³ Department of Mechanical and Process Engineering, ETH Zürich, Zurich, Switzerland

*vlasis@chemeng.upatras.gr, vlasiosm@mat.ethz.ch

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Τα μικύλλια σκωληκοειδούς δομής (WLMs) είναι επιμήκεις δομές αμφίφιλων επιφανειοδραστικών μορίων – όπως το θεϊκό δωδεκύλιο νατρίου (SDS) και ο θεϊκός λαυρυλαιθέρας νατρίου (SLES) – [1] σε υδατικά διαλύματα και απαντώνται σε καθημερινά προϊόντα ευρείας χρήσεως, όπως τα καλλυντικά και τα προϊόντα προσωπικής φροντίδας και υγιεινής. Τα υδατικά διαλύματα επιφανειοδραστικών μορίων παρουσιάζουν εν γένει ιξωδοελαστικές ιδιότητες. Ειδικότερα, με αύξηση της συγκέντρωσής τους και ιδιαίτερα με την προσθήκη άλατος σχηματίζονται γιγάντια μικύλλια σκωληκοειδούς δομής, που οδηγούν σε μεγάλη αύξηση του ιξώδους του διαλύματος λόγω του δικτύου των διαπλοκών που αναπτύσσεται μεταξύ των μικυλλιακών δομών [2]. Όπως και στα πολυμερικά ρευστά μεγάλου μοριακού μήκους, οι τοπολογικοί περιορισμοί που επιβάλλουν οι διαπλοκές παρουσιάζουν διακυμάνσεις με την πάροδο του χρόνου. Επιπρόσθετα, τα μήκη των σχηματιζόμενων μικυλλιακών δομών καλύπτουν ένα μεγάλο εύρος χαρακτηριστικών μηκών και μεταβάλλονται με το χρόνο, καθώς τα μεγαλύτερα μικύλλια διασπώνται σε μικρότερα, ενώ τα μικρότερα μικύλλια επανασυνδέονται σχηματίζοντας μεγαλύτερα [3], με ρυθμούς που καλύπτουν ένα εκτεταμένο φάσμα χρονικών κλιμάκων. Για το λόγο αυτό, αλλά και για να ξεπεραστούν υπολογιστικά προβλήματα λόγω της πεπερασμένης διαθέσιμης υπολογιστικής ισχύος για την προσομοίωση μεγάλου μεγέθους μικυλλιακών δομών σκωληκοειδούς δομής, υιοθετούνται προσεγγίσεις αδροποιημένης αναπαράστασης (coarse-grained, CG) [4-7].

Στην παρούσα εργασία μελετάται η ρεολογική συμπεριφορά διαπλεγμένων μικυλλίων σκωληκοειδούς δομής με τη βοήθεια ενός μεσοσκοπικού μοντέλου και της μεθόδου που είναι γνωστή ως δυναμική κατά Brown (Brownian Dynamics, BD). Τα μικύλλια αναπαρίστανται ως χάντρες που συνδέονται μεταξύ τους με αρμονικά ελατήρια, ενώ για τη μοντελοποίηση των διαπλοκών μεταξύ των διαφορετικών μικυλλιακών αλυσίδων χρησιμοποιούνται ελατήρια ολίσθησης (slip-springs). Για την περιγραφή των φαινομένων διάσπασης και επανασύνδεσης των μικυλλίων λαμβάνεται υπόψη τόσο η πιθανότητα επανασύνδεσης μεταξύ πολύ γειτονικών μικυλλίων όσο και η πιθανότητα τα μικύλλια να διαχυθούν αρκετά και έτσι να μπορέσουν να επανασυνδεθούν με άλλα, αρκετά απομακρυσμένα μικύλλια [7]. Οι προβλέψεις των προσομοιώσεων για τα μορφολογικά και δομικά χαρακτηριστικά των μικυλλιακών δομών επαληθεύουν προταθέντα μοντέλα [3], ενώ τα αποτελέσματα για το ιξώδες μηδενικού ρυθμού διάτμησης και τις ρεολογικές ιδιότητες των μικυλλιακών συστημάτων συγκρίνονται με διαθέσιμα πειραματικά βιβλιογραφικά δεδομένα.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Μικύλλια, Επιφανειοδραστικά μόρια, Δυναμική κατά Brown, Ιξώδες, Μεσοσκοπικά μοντέλα**ΑΝΑΦΟΡΕΣ**[1] Padding, J., Briels, W., Stukan, M., & Boek, E. (2009). *Soft Matter* 5 (22): 4367-4375.

- [2] Parker, A., & Fieber, W. (2013). *Soft Matter* 9 (4): 1203-1213.
- [3] Cates, M. E., & Fielding, S. M. (2006). *Advances in Physics* 55 (7-8): 799-879.
- [4] Peroukidis, S., Tsalikis, D., Noro, M., Stott, I., & Mavrantzas, V. (2020). *J. Chem. Theory Comput.* 16 (5): 3363-3372.
- [5] Peroukidis, S., Mintis, D., Stott, I., & Mavrantzas, V. (2021). *J. Phys. Mater.* 4 (4): 044001.
- [6] Ramírez-Hernández, A., Peters, B., Andreev, M., Schieber, J., & Pablo, J. (2015). *J. Chem. Phys.* 143 (24): 243147.
- [7] Pahari, S., Bhadriraju, B., Akbulut, M., & Kwon J. (2021). *J. Colloid Interface Sci.* 600: 550–560.