

ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΕ ΑΡΑΙΑ ΚΑΙ ΗΜΙΑΡΑΙΑ ΔΙΑΛΥΜΑΤΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ ΜΕΣΩ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ FLUCTUATING HYDRODYNAMICS**Λ. Ι. Κολίτση και Σ. Γ. Γιάντσιο***

Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Τ.Θ. 472, 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

(*giantsio@auth.gr)**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Εφαρμόζονται τεχνικές υπολογιστικής ρευστοδυναμικής για την άμεση αριθμητική προσομοίωση της στιγμιαίας διαμόρφωσης και της κίνησης γραμμικών πολυμερικών μορίων σε αραιά και ημιαραιά διαλύματα, με σκοπό τη μελέτη της ρεολογικής τους συμπεριφοράς, καθώς και της διάχυσης νανοσωματιδίων μέσα σε αυτά. Τα πολυμερικά μακρομόρια αντιπροσωπεύονται με ένα μοντέλο χάντρας-ελατηρίου. Αξιοποιείται η μέθοδος Fluctuating Hydrodynamics η οποία ενσωματώνει έναν επιπλέον στοχαστικό όρο στις εξισώσεις Stokes, λαμβάνοντας έτσι υπόψη τη θερμική μοριακή κίνηση και τις αντίστοιχες τυχαίες δυνάμεις που ασκούνται στα εμβαπτισμένα μακρομόρια και νανοσωματίδια. Από τις προσομοιώσεις απλής διατμητικής ροής εξάγεται το ιξώδες των διαλυμάτων, το οποίο βρίσκεται σε πολύ καλή συμφωνία με τις προβλέψεις της θεωρίας Zimm. Ακολούθως, οι προσομοιώσεις της διάχυσης σφαιρικών νανοσωματιδίων στα διαλύματα δείχνουν ότι όταν η ακτίνα τους είναι παρόμοια ή μεγαλύτερη από τη γυροσκοπική ακτίνα των πολυμερών η διαχυτότητά τους ακολουθεί τις προβλέψεις της εξίσωσης Stokes-Einstein με βάση το υπολογιζόμενο μακροσκοπικό ιξώδες των διαλυμάτων. Αντίθετα, όταν η ακτίνα των σωματιδίων τείνει να είναι αρκετά μικρότερη από τη γυροσκοπική ακτίνα των πολυμερών παρατηρούνται αυξανόμενες θετικές αποκλίσεις. Τα αποτελέσματα αυτά είναι σε ποιοτική συμφωνία με πειραματικές παρατηρήσεις, καθώς και με θεωρητικά μοντέλα τα οποία λαμβάνουν υπόψη ότι τα μικρότερα σωματίδια δειγματοληπτούν και υπόκεινται στις τοπικές αλληλεπιδράσεις με τη μικροδομή των διαλυμάτων και τις αντίστοιχες χωρικές και χρονικές κλίμακες.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Fluctuating Hydrodynamics, Δυναμική διαλυμάτων πολυμερών, Διάχυση νανοσωματιδίων