**Ατομιστικές και Μεσοσκοπικές Προσομοιώσεις Πολυμερικών Υλικών**

Δώρος Ν. Θεοδώρου

*Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ηρώων Πολυτεχνείου 9, Πολυτεχνειούπολη Ζωγράφου, Αθήνα 15780*

Κατά τα τελευταία 35 χρόνια οι μοριακές προσομοιώσεις για την πρόρρηση των σχέσεων δομής- ιδιοτήτων-επεξεργασίας-επιδόσεων των υλικών έχουν αναπτυχθεί σε σημαντικό εργαλείο σχεδιασμού προϊόντων και διεργασιών. Μεγάλη πρόκληση για τις μοριακές προσομοιώσεις αποτελούν οι ευρύτατες κατανομές χαρακτηριστικών μηκών και χρόνων που διέπουν τη μακροσκοπική συμπεριφορά των υλικών. Η πρόκληση αυτή μπορεί ν’ αντιμετωπισθεί με ανάπτυξη ιεραρχικών μεθόδων προτυποποίησης και προσομοίωσης, που χρησιμοποιούν πολλά επίπεδα περιγραφής ενός υλικού, με τις παραμέτρους σε κάθε επίπεδο να αντλούνται από τα πιο θεμελιώδη, λεπτομερέστερα επίπεδα.

Στο σεμινάριο αυτό θα συζητήσουμε μεθόδους για την πρόβλεψη ιδιοτήτων πολυμερικών υλικών μέσω κατασκευής μαθηματικών μοντέλων και προσομοίωσής τους στο ατομιστικό (0.1-10 nm, 1 fs – 1 μs) και μεσοσκοπικό (10 nm – 1 μm, 1 ps-1 ms) επίπεδο. Θα παρουσιάσουμε παραδείγματα υπολογισμών των διαστάσεων μακρομοριακών αλυσίδων σε άμορφες φάσεις, της πυκνότητας, της δομής και των ρεολογικών ιδιοτήτων διαπλεγμένων πολυμερικών τηγμάτων, των ελαστικών σταθερών και φαινομένων δομικής χαλάρωσης σε υαλώδη πολυμερή, επιφανειακών τάσεων πολυμερικών τηγμάτων και έργων συνάφειας μεταξύ αυτών και στερεών υποστρωμάτων, της αντοχής σε διάτμηση διεπιφανειών μεταξύ πολυμερικών μητρών και πληρωτικών υλικών σε νανοσύνθετα υλικά, διαλυτοτήτων και διαχυτοτήτων μικρών μορίων μέσα σε πολυμερή και φαινομένων κρυστάλλωσης. Στόχος είναι να γεφυρωθεί η μακροσκοπική συμπεριφορά που θέλουμε να ελέγξουμε στις εφαρμογές με τη χημική σύσταση και μορφολογία των υλικών, αναπτύσσοντας υπολογιστικά αποτελεσματικές και αξιόπιστες μεθόδους βασισμένες στη στατιστική μηχανική.