

# UNA MIRADA AL COMPORTAMIENTO DINÁMICO Y ESTRUCTURAL EN UN SISTEMA POLIMÉRICO MEDIANTE SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR.

**Cristian Balbuena\*, Nahuel Rull y Ezequiel R. Soulé**

*Instituto de investigación en Ciencia y Tecnología de Materiales, Mar del Plata, Argentina.*

*\*Correo Electrónico: [pele\\_84@hotmail.com](mailto:pele_84@hotmail.com)*

## **RESUMEN**

*Los materiales poliméricos amorfos se utilizan comúnmente en diversos productos industriales. La comprensión de la relación entre el comportamiento estructural y dinámico de las cadenas poliméricas es uno de los problemas abiertos para la ciencia de polímeros y la ingeniería. Esto permite el control de las propiedades viscoelásticas y mecánicas de estos materiales.*

*Durante el enfriamiento del sistema hacia la temperatura de transición vítrea ( $T_g$ ), los polímeros sobreenfriados exhiben una extraordinaria ralentización en el proceso de relajación, lo que resulta en cambios significativos de las propiedades físicas, en especial las propiedades dinámicas, pero no en sus parámetros estructurales. A su vez, se encuentra que la dinámica en algunas regiones del líquido sobreenfriado puede ser órdenes de magnitud más rápida que en otras, este fenómeno se conoce como heterogeneidad dinámica. Si bien ésta fenomenología se ha establecido desde hace varias décadas, aún hoy en día no se tiene una respuesta universal que explique su causa [1-2].*

*En este trabajo se realizan simulaciones de Dinámica Molecular utilizando el método del Ensamble Isoconfiguracional (ICEM) [3] en un modelo de grano grueso (Bead-Spring model). Este modelo describe adecuadamente propiedades de un polímero lineal donde las cadenas no presentan entrecruzamiento. Todos los monómeros interactúan a través de un potencial de Lennard-Jones y se incluyen los términos dispersivos. Los monómeros que están enlazados a lo largo de una cadena interactúan a través de un potencial elástico de resorte no lineal (FENE potential) para representar los enlaces covalentes. El estudio mediante el ICEM nos ha permitido poner en evidencia la existencia de regiones con alta correlación dinámica que son la principal causa de la heterogeneidad dinámica. Esta correlación tiene un origen estructural. Los resultados obtenidos en este trabajo aportan más información sobre el mecanismo molecular subyacente a la transición vítrea en sistemas poliméricos.*

## **ABSTRACT**

*Amorphous polymeric materials are commonly used in various industrial products. In order to control the viscoelastic and mechanical properties of these materials, understanding of the relation between the structure and the dynamics of the polymer chain is one of the essentials problem of polymer science and engineering.*

*When the system is cooled approaching the glass transition temperature ( $T_g$ ), the supercooled polymers exhibit an extraordinary slowing down of relaxation process, resulting in significant changes of physical properties but not in its structural parameters. When a liquid is cooled far below its melting point, the dynamics dynamics in some ranges of temperature can be orders of magnitude faster than in others; this phenomenon is known as dynamic heterogeneity. Although the existence of dynamic heterogeneity has been established for several decades, the most fundamental question, "what causes it?", still has no universal answer [1-2].*

*In this work we perform Molecular Dynamics simulations using the Isoconfigurational ensemble method (ICEM) [3] of a dense Bead-Spring polymer model, where the chains are unentangled. All monomers interact via a force-shifted Lennard-Jones potential, and dispersive attractions are included. Neighboring monomers along a chain also interact via a finite extensible nonlinear elastic (FENE) spring potential to create covalent bonds.*

*The ICEM allowed us to put into evidence the existence of regions with high correlation dynamics that causes the dynamic heterogeneity. This correlation has a structural origin. The results obtained with this method provide more information about the molecular mechanism underlying the glass transition in polymer systems.*

## **REFERENCIAS**

1. Y. Gebremichael, T. B. Schröder, F. W. Starr, and S. C. Glotzer, “Spatially correlated dynamics in a simulated glass-forming polymer melt: Analysis of clustering phenomena”; *Physical Review E*, Vol. 64 (2001), p 1-13.
2. B. Rijal, L. Delbreilh, and A. Saiter, “Dynamic Heterogeneity and Cooperative Length Scale at Dynamic Glass Transition in Glass Forming Liquids”; *Macromolecules*, Vol. 48 (2015), p. 8219–8231.
3. A. Widmer-Cooper, P. Harrowell and H. Fynewever, “How Reproducible Are Dynamic Heterogeneities in a Supercooled Liquid?”; *Physical Review Letters*, Vol. 93 (2004) p. 135701.

**TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO:** *T18*

**PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER):** *P (poster)*