



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

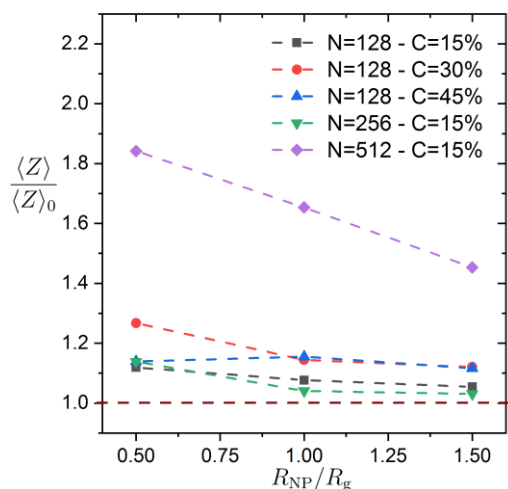
Viscoelasticidad de Nanopuestos Poliméricos

Lara Negri¹, Leopoldo R. Gómez¹, Daniel A. Vega¹, Nicolás A. García¹

¹Departamento de Física, UNS-IFISUR-CONICET, Bahía Blanca (8000), Argentina
laranegri98@gmail.com

Introducción

En las últimas décadas, ha habido una creciente demanda de materiales novedosos y tecnologías de nanofabricación rentables para diferentes aplicaciones y los nanocompuestos han atraído una considerable atención debido a sus propiedades físicas mejoradas y su versatilidad mecánica. Los nanocompuestos poliméricos son una clase fascinante de materiales híbridos que contienen nanopartículas (NPs) típicamente inorgánicas incrustadas en una matriz polimérica que permiten ajustar las propiedades macroscópicas a escala nanométrica. Por ejemplo, se pueden usar para hacer membranas de filtración que sean selectivas y permeables, y se ha demostrado que la presencia de NPs y la interacción con el polímero pueden influir en el volumen libre, la dinámica de la cadena e incluso en el envejecimiento del polímero, que a su vez afecta el transporte molecular del filtrado a través de la membrana [1, 2]. En este trabajo, se utilizan simulaciones de dinámica molecular para investigar la física de los nanocompuestos poliméricos y el papel que juegan los enredos de las cadenas del polímero en su estabilidad y cómo definen sus propiedades viscoelásticas y los tiempos característicos de relajación.



Resultados y Conclusiones

La Figura 1 muestra la cantidad de entrelazamientos por cadena $\langle Z \rangle$ en función de la relación de aspecto entre el radio de las NPs y el radio de giro del polímero para diferentes concentraciones de NPs normalizada respecto del sistema puro (sin NPs, $C=0\%$). Como se puede observar en la Figura 1, en general, un aumento en la concentración de las NPs incrustadas en la matriz polimérica (15%-30%) incrementa considerablemente los enredos moleculares de las cadenas (casi al doble para $N=512$) y esto claramente refuerza las propiedades mecánicas del nanocompuesto, aumentando su módulo elástico y su viscosidad [3]. Además, se ve una reducción de los enredos a medida que las NPs incrementan su tamaño respecto a las cadenas. Este efecto podría estar inducido por el confinamiento local que generan las NPs cercanas entre sí [4].

Finalmente, puede verse que para muy altas concentraciones ($C=45\%$) el efecto de refuerzo se desvanece. Se determinó que esto se relaciona con la aglomeración local de las partículas (incluso se observó cristalización). Así, se encontró un rango óptimo de concentraciones capaces de lograr una buena dispersión de las NPs en la matriz polimérica donde se refuerzan las propiedades mecánicas; lo que generalmente se busca a la hora de considerar sus aplicaciones tecnológicas.

Referencias

- [1] Merkel, T.C., Freeman, B.D. et al., *Science*, **296**, 519-522 (2002)
- [2] Ramesh, N., Davis, P.K et al., *J. Polym. Sci. B Polym. Phys.*, **49**, 1629-1644 (2011)
- [3] Wang, H., Hor J.L., et al., *ACS Nano*, **12**, 5580-5587 (2018)
- [4] García N. A., Barrat, J.-L., *Macromolecules* **51**, 9850-9860 (2018)