

## ΜΕΛΕΤΗ γ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗΣ ΜΟΡΦΗΣ ΙΣΟΤΑΚΤΙΚΟΥ ΠΟΛΥΠΡΟΠΥΛΕΝΙΟΥ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Ν. Α. Ρωμανός<sup>1</sup>, Δ. Ν. Θεοδώρου<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα

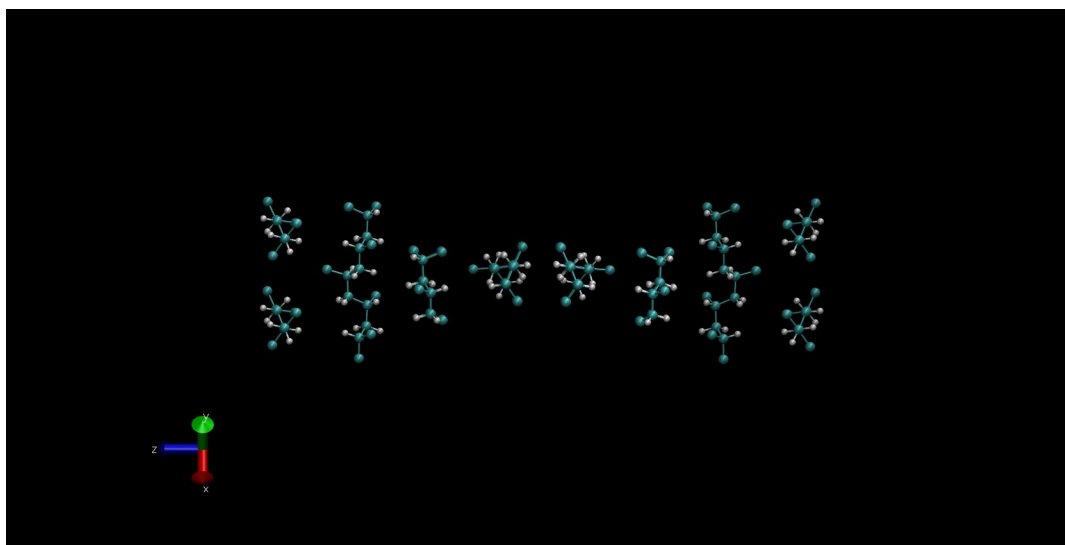
(\* [doros@chemeng.ntua.gr](mailto:doros@chemeng.ntua.gr))

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το ισοτακτικό πολυπροπυλένιο (i-PP) είναι ένα ημικρυσταλλικό πολυμερές το οποίο, στην κρυσταλλική του φάση, απαντάται με τις κρυσταλλικές μορφές α1, α2, β, γ καθώς και συνδυασμούς αυτών. Η μελέτη της κρυσταλλικής συμπεριφοράς και των ιδιοτήτων του υλικού αυτού σε μοριακό επίπεδο θα συμβάλει στην κατανόηση των μηχανισμών εκείνων που επηρεάζουν τη συμπεριφορά του κάτω από διαφορετικές συνθήκες και εν τέλει στην παραγωγή υλικών με συγκεκριμένες προδιαγραφές.

Η παρούσα εργασία βασίζεται στη μελέτη που έχει πραγματοποιηθεί<sup>[1,2]</sup> για τη δομή και τις ιδιότητες της α1 και α2 μορφής του i-PP, αντίστοιχα, σε προγενέστερες εργασίες και επεκτείνει την ανάλυση της κρυσταλλικής συμπεριφοράς του υλικού αυτού στη γ μορφή. Αυτό που ξεχωρίζει την εν λόγω μορφή είναι ότι ναι μεν έχει και αυτή δίστοιβο στρώμα, αλλά η αντιπαραβολή κάθε στρώματος δεν είναι παράλληλη, αλλά υπό γωνία.

Για τη διεξαγωγή των προσομοιώσεων καταρχάς δημιουργήθηκε η γ κρυσταλλική μορφή από κρυσταλλικά δεδομένα. Η εν λόγω κρυσταλλική μορφή είναι ορθορομβική, εν αντιθέσει με τις α κρυσταλλικές μορφές που είναι μονοκλινείς. Εν συνεχεία προστέθηκαν τα υδρογόνα και δημιουργήθηκε η τοπολογία του υλικού. Ο βαθμός πολυμερισμού του υλικού είναι πρακτικά σταθερός, διότι αν και στη μοναδιαία κυψελίδα υπάρχουν δύο διαφορετικά μήκη της εκάστοτε αλυσίδας από σύνολο 12 αλυσίδων, εντούτοις αυτός ο περιορισμός γίνεται λιγότερο ισχυρός καθώς πηγαίνουμε σε μεγαλύτερα κουτιά προσομοίωσης. Στόχος των μοριακών προσομοιώσεων ήταν να ελεγχθεί σε χαμηλές θερμοκρασίες η σταθερότητα της δομής αρκετά κάτω της θερμοκρασίας υαλώδους μετάπτωσης και θερμοκρασίας τήξης, καθώς επίσης και το φαινόμενο της περιστροφής των αλυσίδων.



Σχήμα 1. γ κρυσταλλική μορφή ισοτακτικού πολυπροπυλενίου

### ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Romanos N.A., Theodorou D.N. (2016). *Macromolecules*, 49(12): 4663-4673.
- [2] Ρωμανός, Ν.Α., Θεοδώρου Δ.Ν. (2017). 11<sup>ο</sup> ΠΕΣΧΜ, Θεσσαλονίκη