

**ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΕΠΟΞΕΙΔΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ EPON-862 / DETDA:****ΔΟΜΗ, ΤΟΠΟΛΟΓΙΑ,  
ΕΛΑΣΤΙΚΕΣ ΣΤΑΘΕΡΕΣ, ΔΥΝΑΜΙΚΗ****Σ. Β. Καλλιβωκάς<sup>1</sup>, Α.Π. Σγούρος<sup>1</sup>, Δ.Ν.Θεοδώρου<sup>1\*</sup>**<sup>1</sup>Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα

(\*spyros.kallivokas@gmail.com)

**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Οι δομικές, τοπολογικές, μηχανικές και δυναμικές ιδιότητες των εποξειδικών δικτύων EPON-862 / DETDA διερευνώνται με προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής. Τα εποξειδικά δίκτυα αποτελούνται από τη ρητίνη διγλυκιδυλαιθέρα της δισφαινόλης F (DGEBF), επίσης γνωστή ως EPON-862, και το σκληρυντή διαιθυλο τολουόλιο διαμίνη (DETDA). Τα δίκτυα κατασκευάστηκαν μέσω του υπολογιστικού πακέτου MAPS<sup>[1,2]</sup>, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο σταυροδέσμησης των Li και Strachan<sup>[2]</sup>. Αναλύονται συστήματα με τέσσερις διαφορετικούς βαθμούς σταυροδέσμησης. Σχολιάζεται επίσης το αποτέλεσμα του βαθμού της σταυροδέσμησης στις μελετώμενες ιδιότητες. Οι υπολογιζόμενες ποσότητες ανακτώνται χρησιμοποιώντας διάφορες στρατηγικές προσομοίωσης και αριθμητικές μεθόδους στατιστικής μηχανικής, ώστε να αποκτηθεί μια αυστηρή και ασφαλής κατανόησή τους σε μοριακό επίπεδο και να αξιολογηθούν συγκριτικά οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται. Μελετάται και αναλύεται η τοπική δομή των εποξειδικών δικτύων EPON-862 / DETDA μέσω των μερικών συναρτήσεων κατανομής ζευγών ατόμων, των μερικών παραγόντων δόμησης των Faber-Ziman και μέσω προσομοιωμένων περιθλασιογραμμάτων ακτίνων Χ. Τα τελευταία παρουσιάζουν καλή συμφωνία με πειραματικά περιθλασιογράμματα από παρόμοια εποξική ρητίνη<sup>[4,5]</sup>. Εξετάζεται η τοπολογία των δικτύων, με σκοπό την εκτίμηση της συνδεσιμότητας τους, της έκτασης των υποδικτύων, της κατανομής των αμινών, και της κατανομής των σταυροδεσμών. Οι ελαστικές σταθερές των συστημάτων ανακτώνται χρησιμοποιώντας δύο μεθόδους προσομοίωσης εντός ισορροπίας (ανάλυση των διακυμάνσεων του όγκου, σχέση Parrinello-Rahman για τις διακυμάνσεις των στοιχείων του ταυσιτή παραμόρφωσης υπό δεδομένη τάση) και μια εκτός ισορροπίας (μονοαξονική έκταση/θλίψη υπό καθορισμένο ρυθμό παραμόρφωσης). Τέλος, οι θερμοκρασίες υαλώδους μετάπτωσης των συστημάτων υπολογίζονται παρακολουθώντας την πυκνότητα ως συνάρτηση της θερμοκρασίας σε υπολογιστικά πειράματα ψύξης, αλλά και μέσω ανάλυσης της δυναμικής αναπροσανατολισμού των δεσμών άνθρακα-οξυγόνου και άνθρακα-υδρογόνου, που περιγράφουν τις διαδικασίες χαλάρωσης σε επίπεδο μονομερικών τμημάτων, υπό διάφορες θερμοκρασίες<sup>[6]</sup>.

**ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ**

- [1] Scienomics, MAPS<sup>®</sup>, Paris, 2015
- [2] D. N. Theodorou and U. W. Suter, *Macromolecules*, 1985, 18, 1467–1478..
- [3] C. Li and A. Strachan, *Polymer*, 2010, 51, 6058–6070.
- [4] R. Ianchis, I. D. Rosca, M. Ghiurea, C. I. Spataru, C. A. Nicolae, R. Gabor, V. Raditoiu, S. Preda, R. C. Fierascu and D. Donescu, *Appl. Clay Sci.*, 2015, 103, 28–33.
- [5] B. Yu, Y. Shi, B. Yuan, S. Qiu, W. Xing, W. Hu, L. Song, S. Lo and Y. Hu, *J. Mater. Chem. A*, 2015, 3, 8034–8044.
- [6] S.V. Kallivokas, A.P. Sgouros, D.N.Theodorou, *Soft Matter*, 2019, 15, 721