

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ  
ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ  
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥΠΟΛΗ, 157 84 ΑΘΗΝΑ

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ  
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ  
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥΠΟΛΗ, 157 80 ΑΘΗΝΑ

## ΣΕΜΙΝΑΡΙΑ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΥΜΠΥΚΝΩΜΕΝΗΣ ΥΛΗΣ

Παρασκευή 5/3/2010 ώρα 12:00 μ.

Πολυτεχνειούπολη,  
Αίθουσα Σεμιναρίων Τομέα Φυσικής,  
(Αίθουσα 027, Ισόγειο κτιρίου Φυσικής)

### Κατανόηση και σχεδίαση πολύ-λειτουργικών μακρομοριακών δομών στη νανοκλίμακα: Μεσοσκοπική θεώρηση

Κωνσταντίνος Χαρ. Νταουλάς

*Institut für Theoretische Physik, Georg-August Universität, 37077 Göttingen, Germany*

Η χρήση αυτο-οργανούμενων μακρομοριακών συστημάτων αποτελεί μία από τις κύριες στρατηγικές δημιουργίας δομών και λειτουργικών υπερμοριακών σχηματισμών για εφαρμογές στη νανο- και βιοτεχνολογία. Τα συστήματα αυτά παρουσιάζουν στη μεσο-κλίμακα ένα ευρύτατο φάσμα χαρακτηριστικών μηκών και χρόνων, οπότε η κατανόηση της συμπεριφοράς τους απαιτεί τη χρήση μεθόδων προσομοίωσης βασισμένων σε αδροποιημένα μοντέλα. Στην παρούσα ομιλία θα αναφερθούμε κυρίως σε υβριδικές τεχνικές όπου τα συστήματα που ενδιαφέρουν περιγράφονται ως σύνολο μορίων αδροποιημένης αρχιτεκτονικής με τις μη- δεσμικές αλληλεπιδράσεις τους να ορίζονται μέσω κατάλληλα επιλεγμένων συναρτησιακών τις τοπικής συγκέντρωσης των διαφόρων συστατικών. Θα παρουσιάσουμε την εφαρμογή των μεθόδων αυτών στην μελέτη νανοδομών σε λεπτά υμένα συσταδικών συμπολυμερών προσροφημένων πάνω σε στερεά υποστρώματα που παρουσιάζουν μεγάλο ενδιαφέρον για την δημιουργία στοιχείων ηλεκτρονικών κυκλωμάτων. Για τις εφαρμογές αυτές ιδιαίτερη σημασία έχει η ανάπτυξη μεθόδων ελέγχου και καθοδήγησης της μοριακής οργάνωσης με χρήση υποστρωμάτων κατάλληλα τροποποιημένων ώστε τμήματά τους να είναι προτιμητέα για την μία συστάδα ενώ η υπόλοιπη επιφάνεια να προτιμάται από το άλλο τμήμα του συμπολυμερούς. Στην προκειμένη περίπτωση χρησιμοποιούμε μεσοσκοπικές Προσομοιώσεις Μεμονωμένης Αλυσίδας σε Μέσο Πεδίο (ΠΜΑΜΠ) οι οποίες παρέχουν σημαντικές πληροφορίες για την τρισδιάστατη οργάνωση του πολυμερούς στον χώρο και βοηθούν τα μέγιστα στην κατάλληλη προσαρμογή της σύστασης των συστημάτων για την αναπαραγωγή της επιθυμητής μορφολογίας. Πέραν της μεθοδολογίας ΠΜΑΜΠ, αναπτύσσουμε τεχνικές Monte Carlo που μπορούν να χρησιμοποιηθούν, στα πλαίσια των μοντέλων των συναρτησιακών της τοπικής συγκέντρωσης, για την μελέτη μιας πληθώρας αυτό-οργανούμενων μακρομοριακών συστημάτων. Αναφέρουμε χαρακτηριστικά τη μελέτη των υπερμοριακών πολυμερών, δηλ. μακρομορίων όπου τα μονομερή τους συνδέονται με μη μόνιμους, αντιστρέψιμους δεσμούς. Τυπικό παράδειγμα αποτελούν τα δισυσταδικά συμπολυμερή με μία υπερμοριακή συστάδα, για τα οποία θα δούμε ότι οι καινούργιες τεχνικές προσομοίωσης προβλέπουν ένα ευρύτατο φάσμα διαφορετικών μορφολογιών. Θα κλείσουμε την παρουσίαση εστιάζοντας στην εφαρμογή των εν λόγω μεθόδων στη μελέτη πολύ-λειτουργικών μοριακών σχηματισμών όπως είναι τα πολυμεροσώματα (πολυμερικά κυστίδια) που αναπτύσσονται σε υδατικά διαλύματα αμφίφιλων συμπολυμερών και τα οποία παρουσιάζουν έντονο ενδιαφέρον για ιατροφαρμακευτικές εφαρμογές.

**Ο κ. Νταουλάς είναι υποψήφιος για τη θέση Επίκουρου Καθηγητή με γνωστικό αντικείμενο «Θεωρητική Φυσική Συμπυκνωμένης Ύλης» στον Τομέα Φυσικής**

---

#### Υπεύθυνοι Οργάνωσης Σεμιναρίων:

Σ. Γλένης

Πανεπιστήμιο Αθηνών,

τηλ. 210 7276811

sglenis@phys.uoa.gr

Γ. Βαρελογιάννης

Ε. Μ. Π.

τηλ. 2107723710

varelogi@central.ntua.gr