

Um Modelo Fenomenológico para Misturas de Polímeros com Ligações Cruzadas

Marcelo Shoey de Oliveira Massunaga

Universidade Estadual do Norte Fluminense

Marco Paniconi, Yoshitsugu Oono

Universidade de Illinois em Urbana-Champaign

Se analisarmos misturas de dois polímeros incompatíveis com ligações cruzadas, veremos que elas também apresentam segregação de fases semelhante à apresentada por misturas de copolímeros de dois blocos. Entretanto, as misturas de polímeros com ligações cruzadas não devem apresentar ordenamento global. Por outro lado, na ausência de efeitos hidrodinâmicos, misturas de copolímeros de dois blocos dificilmente atingem o ordenamento global. Sendo assim, podemos fazer a seguinte pergunta: Qual é a diferença entre os padrões formados entre misturas de copolímeros de dois blocos e misturas de dois polímeros com ligações cruzadas? Como nos modelos existentes na literatura essa diferença não é bem discutida, usaremos o Modelo de Dinâmica Celular para abordar essa questão.

O Modelo de Dinâmica Celular (MDC) é um esquema computacional bastante eficiente para estudar a segregação de fases em misturas de polímeros. Nesse trabalho, propomos um MDC para analisar misturas de polímeros com ligações cruzadas. Para misturas de copolímeros de dois blocos, o MDC já vem sendo utilizado com sucesso.

O efeito das ligações cruzadas é o de ancorar a estrutura espacial impedindo a segregação total ou a formação de estruturas regulares. No MDC, esse efeito é incluído através da imposição de restrições na dinâmica local do sistema, ou através da inclusão de uma flutuação congelada da concentração inicial. Ambos os casos são analisados e os resultados comparados com os das misturas de copolímeros de dois blocos.

Nossos resultados mostram que para o caso das cadeias de tamanhos diferentes e para condições de contorno móveis, é possível identificar diferenças nos padrões. Propomos também um simples experimento para analisar a diferença entre os dois sistemas.
