

Física de la matèria condensada

Tema 5. Matèria Condensada tova

5.1 Introducció

5.2 Polímers

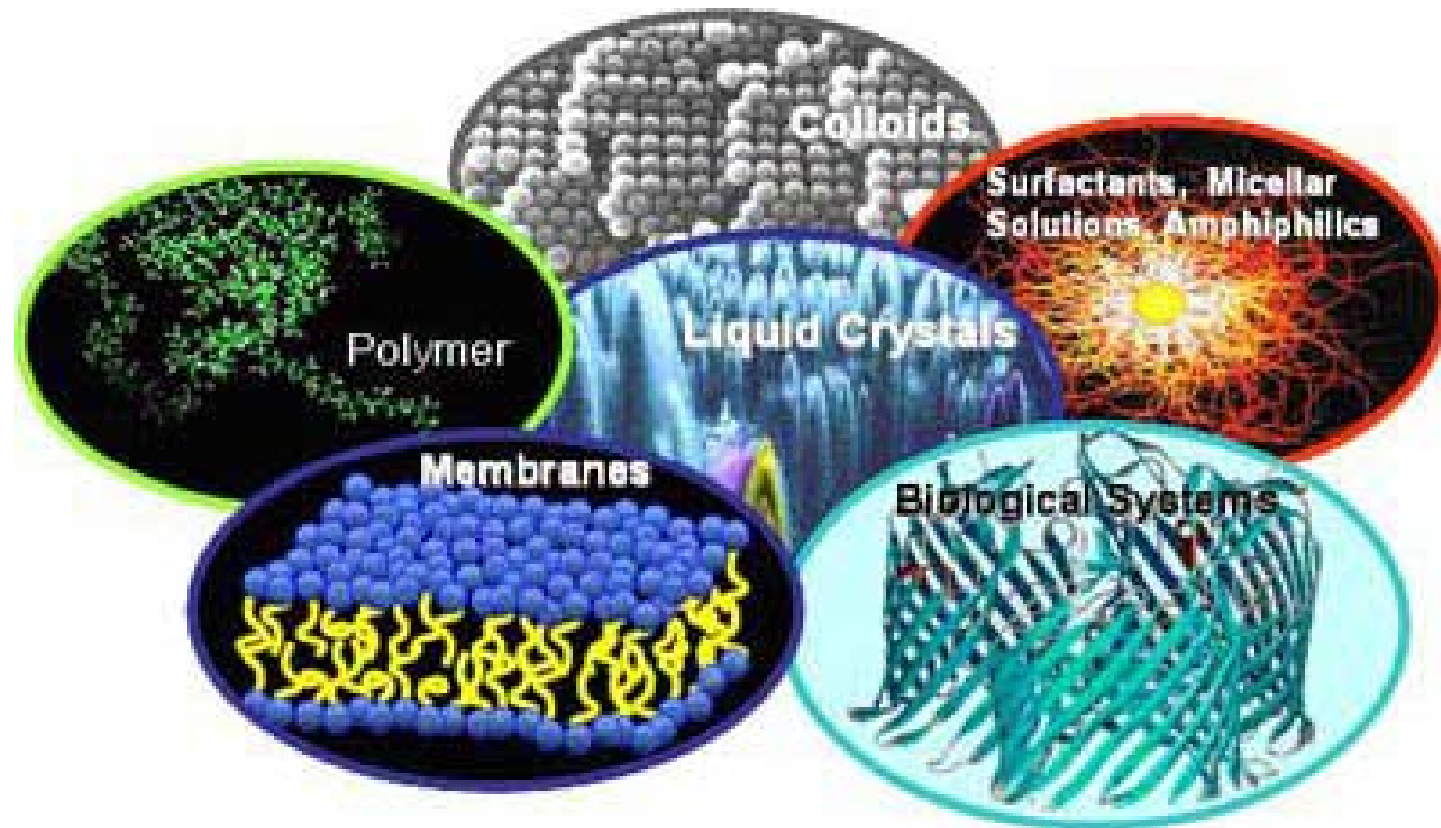
Bibliografia:

- R. A. L. Jones, "Soft Condensed Matter",
Oxford University Press, 2002
- M. Doi, "Introduction to polymer physics",
Clarendon Press, 1996

Què és la Matèria Condensada tova?

- ✓ Concepte genèric que inclou sistemes que no són ni líquids simples ni sòlids cristal·lins.
- ✓ Àrea interdisciplinària, on tenen aplicació conceptes i tècniques de Física, Química Física, Biologia i Ciència de Materials
- ✓ Involucren escales de temps i longitud intermitges (microscòpic) i macroscòpiques
 - ✓ Tamany típic d'una partícula col·loïdal: $1\mu\text{m}$
longitud d'una cadena d'un polímer: 10nm ;
 - ✓ Temps característic d'un plegament de proteïnes: $1\mu\text{s}$

These are typical soft matter materials:

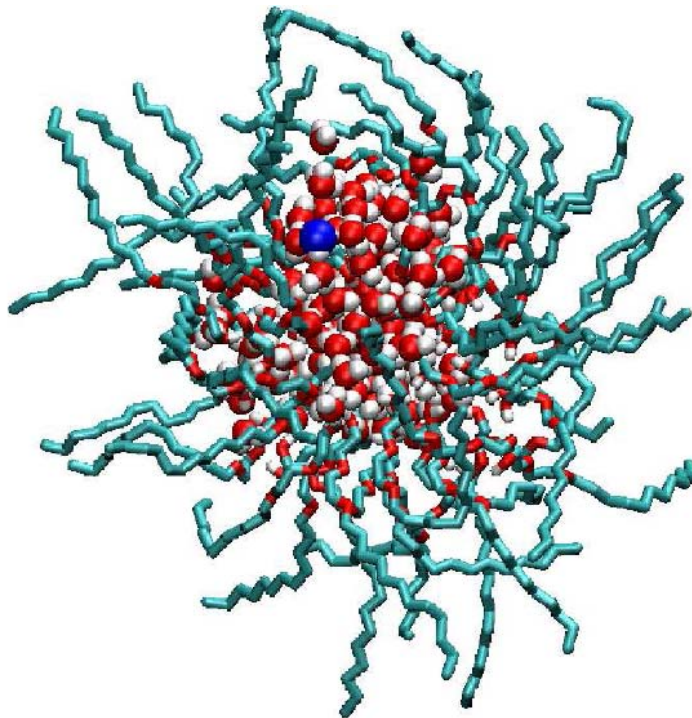


<http://www.eu-softcomp.net/>

SoftComp Website

✓ tenen una gran capacitat d'auto-ensamblarse per formar estructures més complexes

Snapshot of an aqueous reverse micelle. *J. Rodríguez, D. Laria, E. Guardia, J. Martí, Phys.Chem.Chem.Phys. (in press)*



System:

$N_s=50$ surfactant+

$N_w=119$ water molècules

Figure 1: Snapshot of the protonated non-ionic aqueous $C_{12}E_2$ micelle in equilibrium at room temperature. Oxygens (dark grey), hydrogens (white), surfactants (clear grey), hydronium (black, larger size). Color online: Oxygens (red), hydrogens (white), surfactants (cyan), hydronium (blue, larger size).

✓ Poden presentar una gran varietat de transicions de fase.

✓ es poden estudiar a nivell atòmic

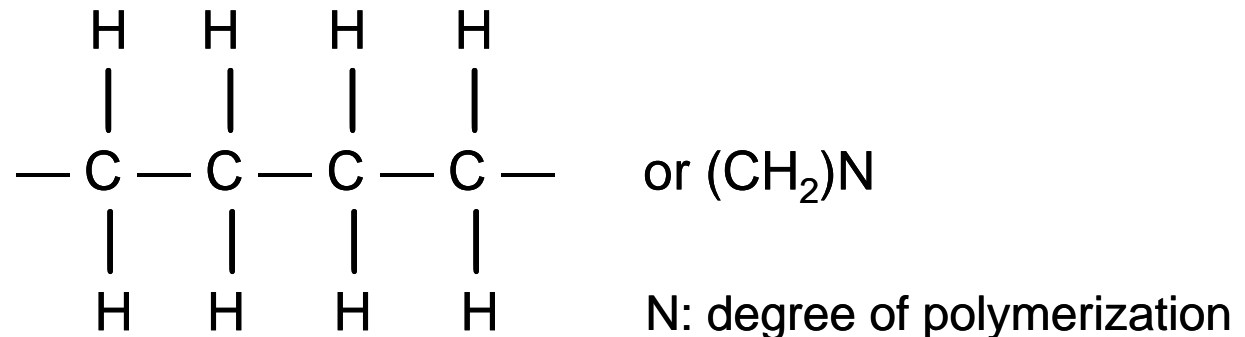
✓ o bé a escala mesoscòpica

- models "coarse-grained"
- tècniques de simulació com la "Dissipative Molecular Dynamics"

Què són els polímers ?

✓ Materials constituïts per cadenes *lineals* molt llargues obtingudes a partir de la unió de moltes molècules petites (anomenades *monomers*)

Polyethylene



✓ Un polímer típic pot tenir desenes de milers de monomers. Degut al seu tamany, els polímers es consideren macromolècules

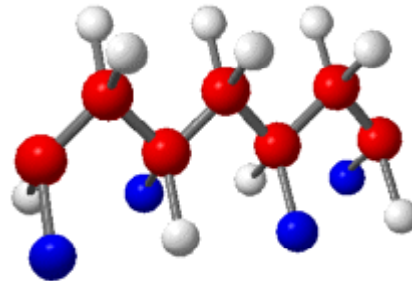
Configuracions possibles

"Isotactic"



tots els grups d'un mateix tipus col.locats al mateix costat

"Syndiotactic"



els grups d'un mateix tipus col.locats alternativament a un costat i a l'altre

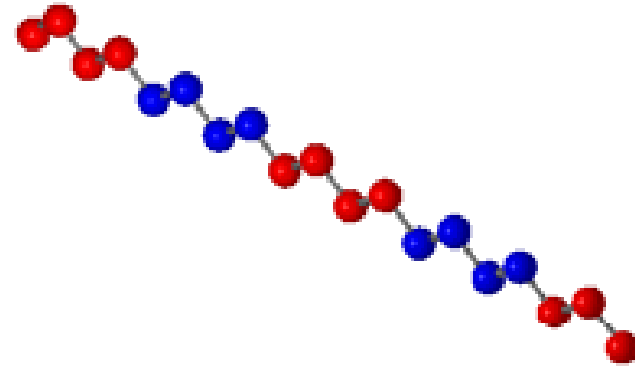
"Atactic" *grups d'un mateix tipus col.locats aleatòriament*

**Configuracions molt estables;
els polímers presenten "quenched disorder"**

Copolímers Polímers amb més d'un tipus de monòmers

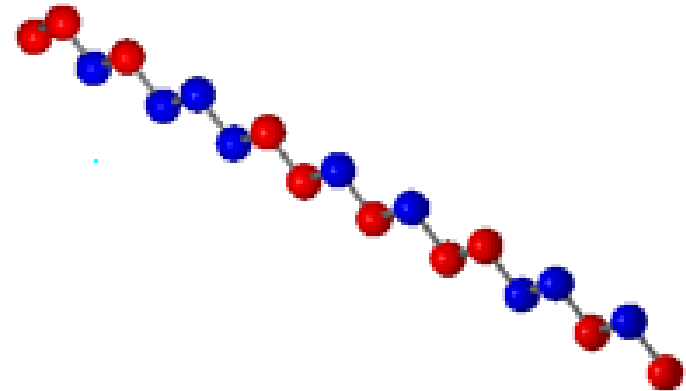
"Block copolymer"

Els monòmers diferents apareixen agrupats en blocs



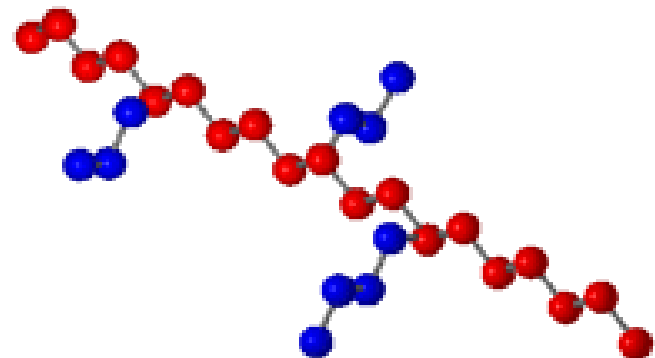
"Random copolymer"

Els monòmers diferents apareixen distribuïts aleatòriament



"Graft copolymers"

Columna central amb un dels monòmers i branques amb la resta

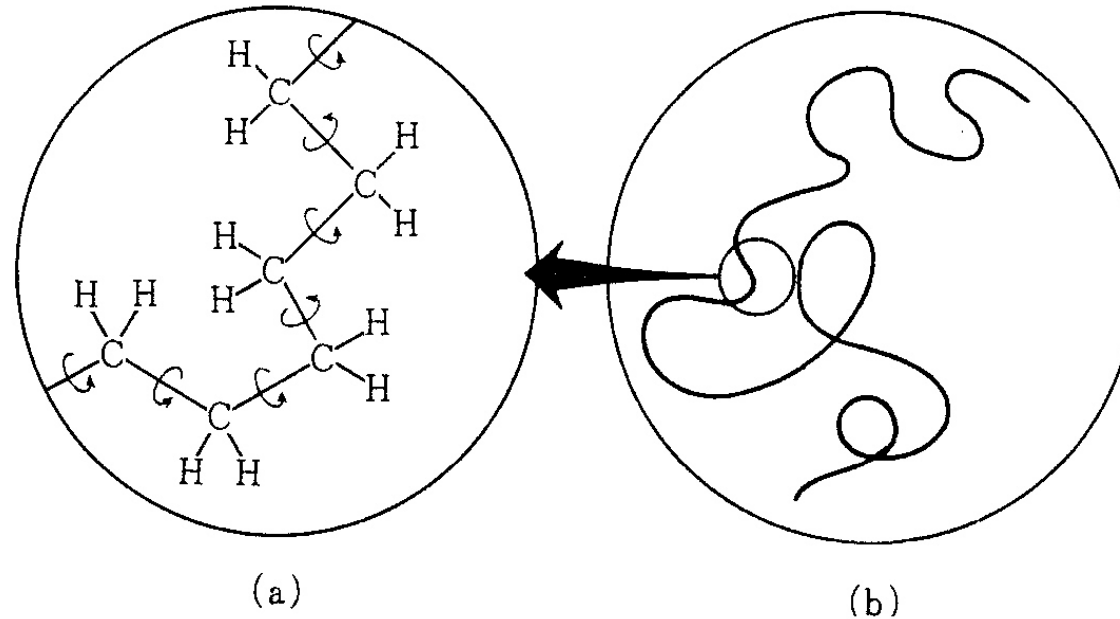


En quins estats físics apareixen?

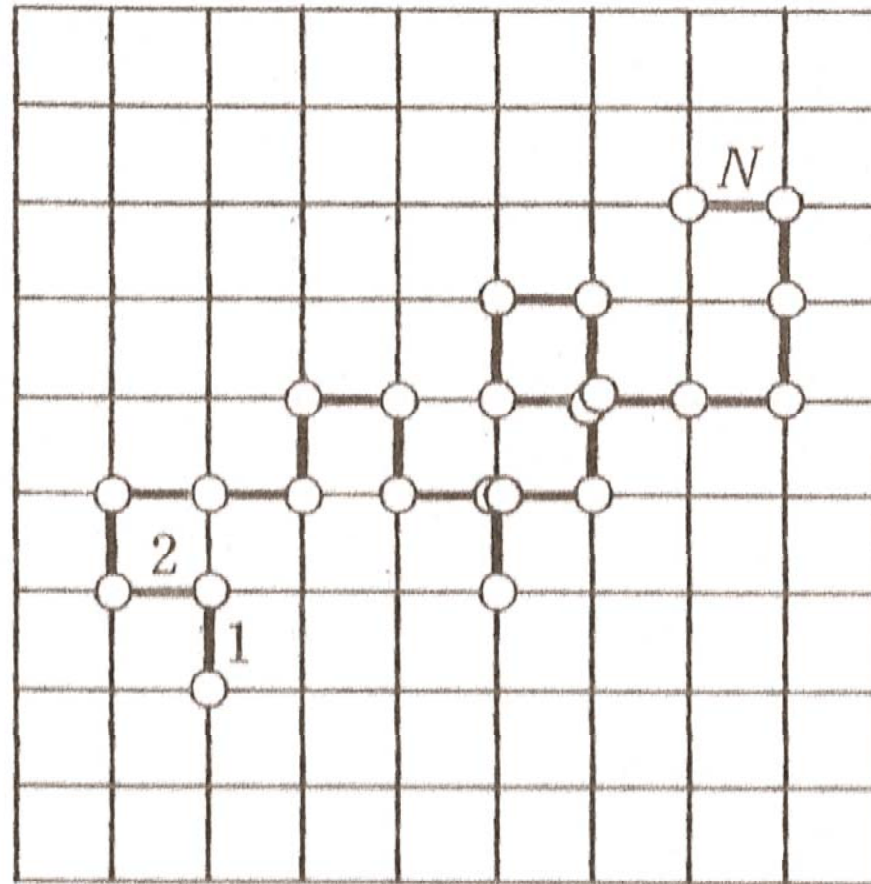
- En estat líquid: polymer melts and solutions
sistemes amb una viscositat molt gran,
i sovint amb propietats viscoelàstiques
- En forma de vidres: polystyrene and
poly(methyl methacrylate)
- Com a materials semi-cristal·lins: polyethylene
and starch
petits cristalls en una matriu de material amorf
- Com cristalls líquids: Kevlar
polímers constituïts per molècules rígides

Propietats d'una molècula aïllada

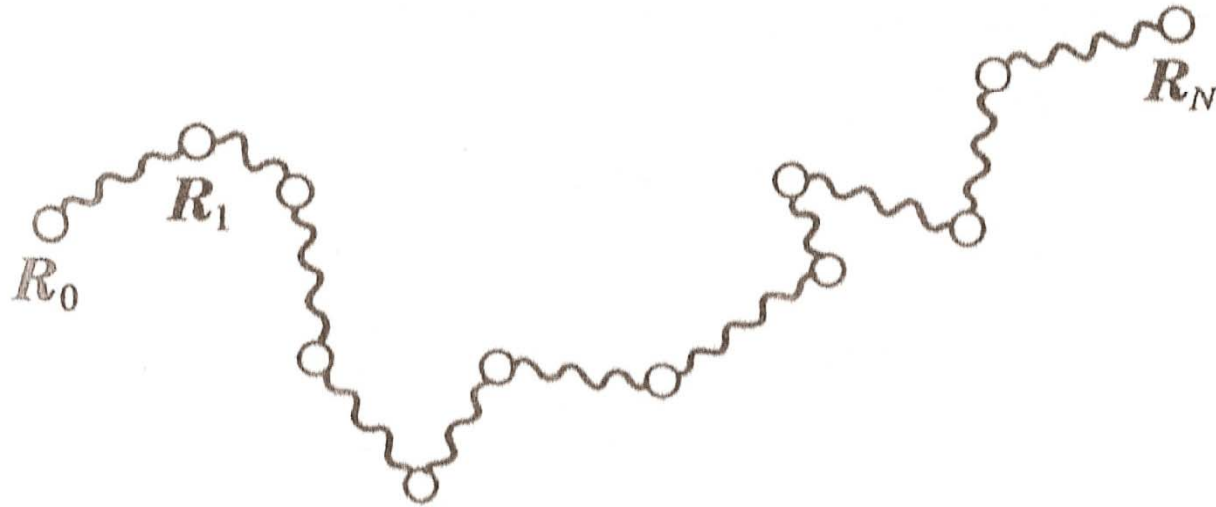
"random walk model"



- (a): The atomic structure of a polyethylene molecule**
(b): An overall view of the molecule



The random walk model of the polymer. The white circles are the segments and the thick lines are the bonds.

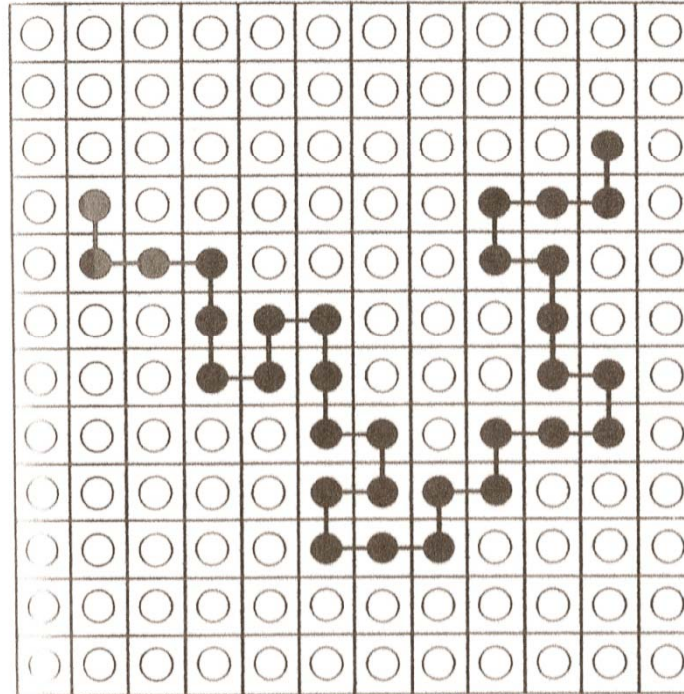


A gaussian chain (a bead-spring model)

Energy of the chain:
$$U = \frac{1}{2} k \sum_{n=1}^N (\vec{R}_n - \vec{R}_{n-1})^2$$

Spring constant:
$$k = \frac{3K_B T}{b^2}$$

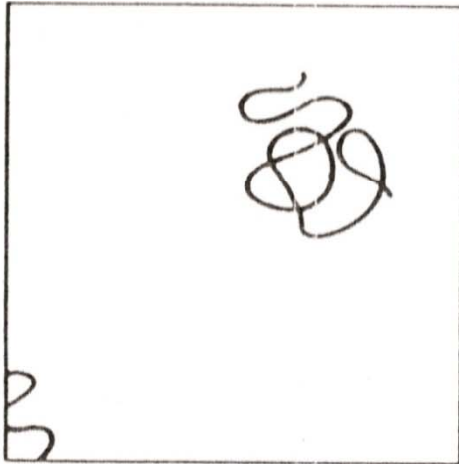
Non-ideal chains: the excluded volume effect



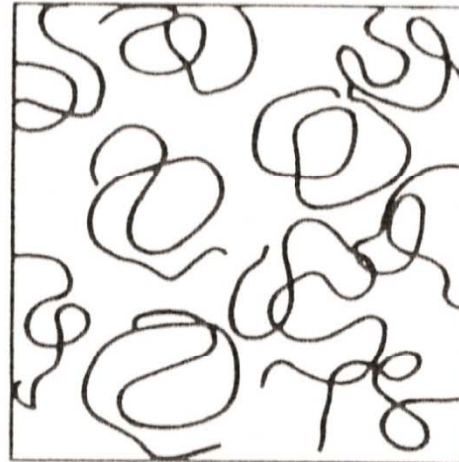
The lattice model of the excluded volume chain. The black circles are the segments of the polymer and the white circles are the solvent molecules.

From numerical simulations: $R_g \propto N^{0.588} b$

Concentrated solutions and melts: "entanglement"



(a) $c < c^*$



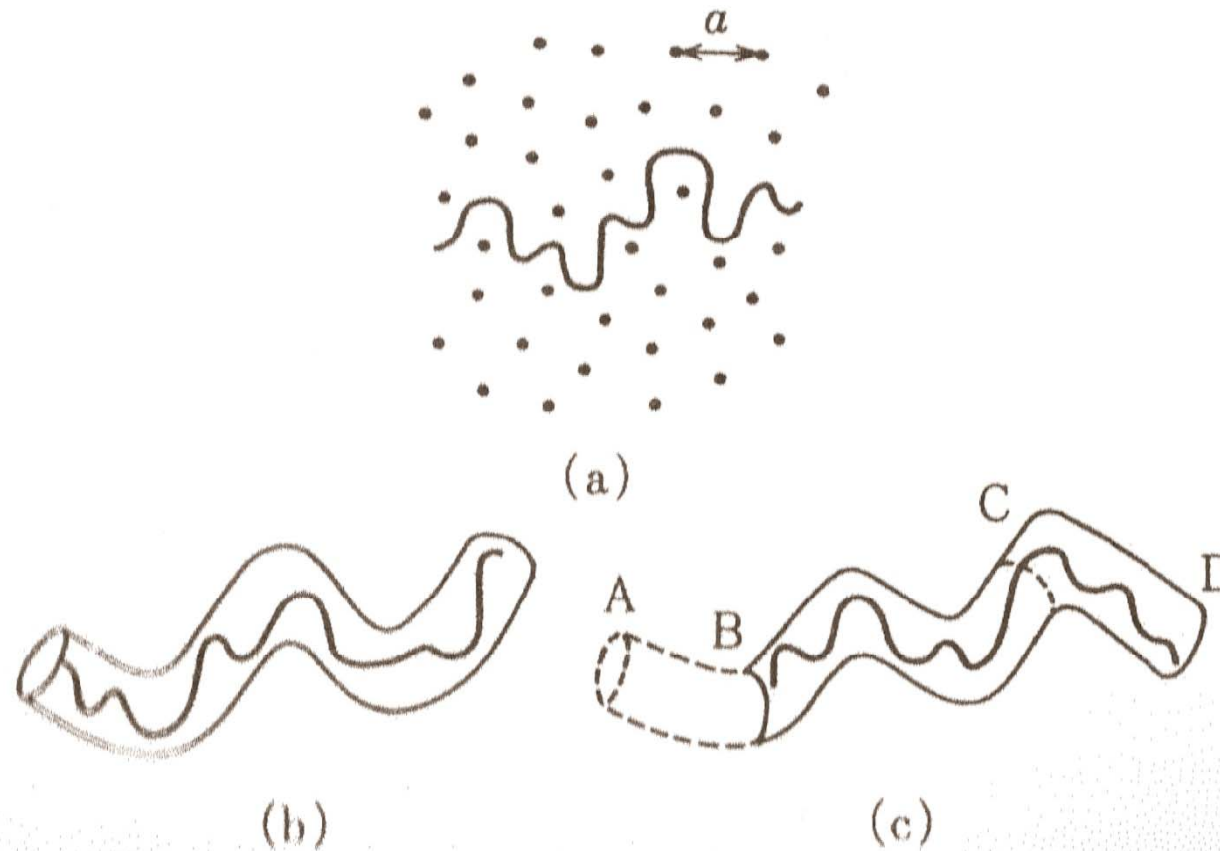
(b) $c \approx c^*$



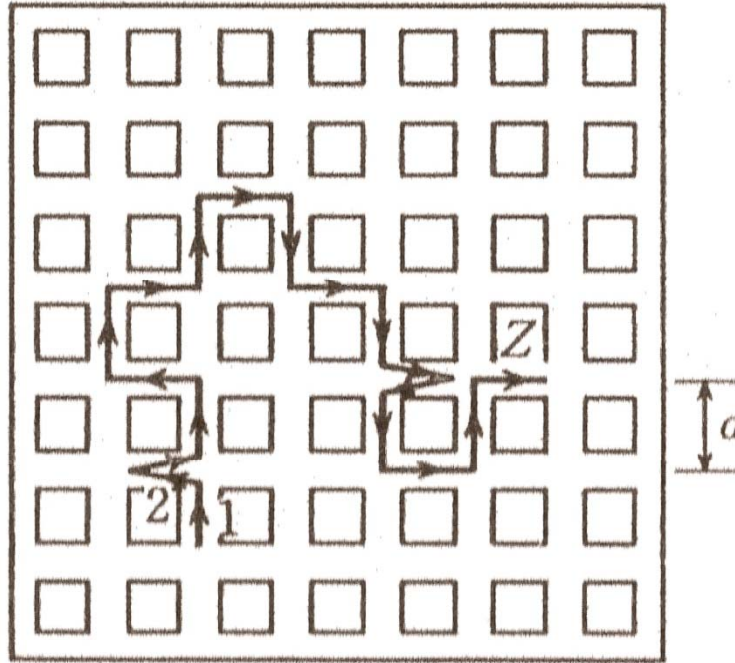
(c) $c > c^*$

(a) a dilute solution; (b) a solution at the overlap concentration; (c) a concentrated solution.

Molecular motion in entangled polymer systems



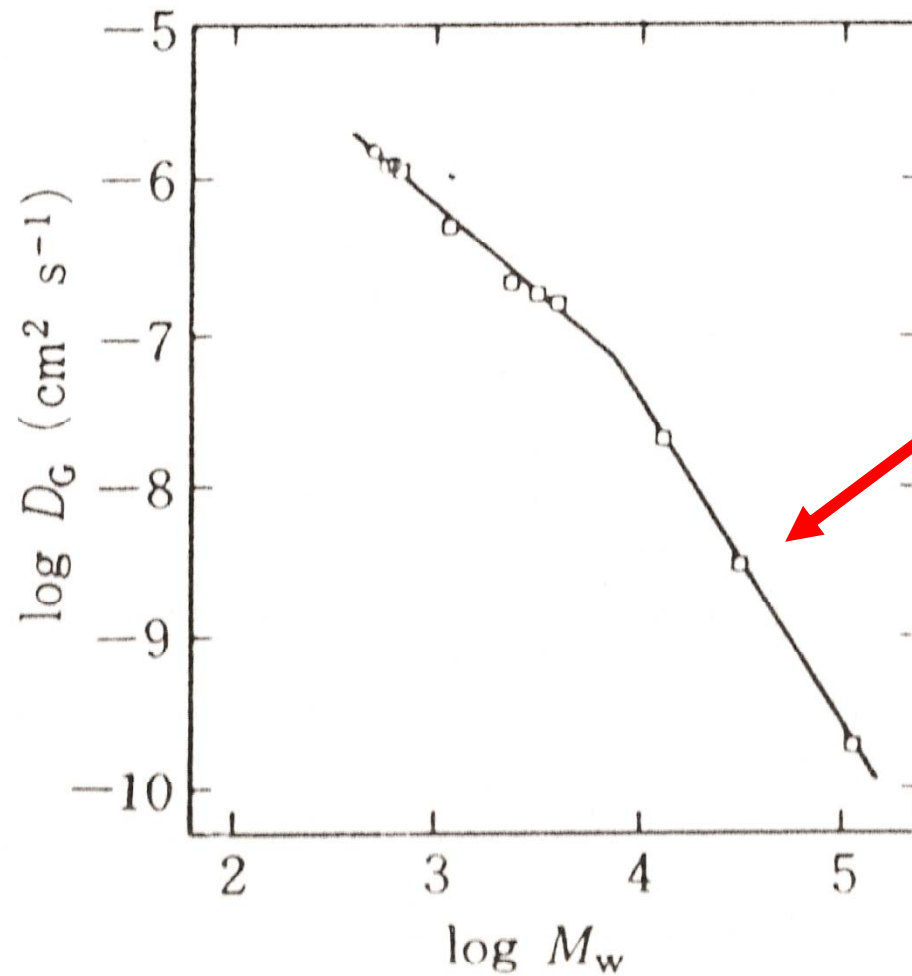
(a) A polymer moving in a fixed network; (b) the tube model; (c) the situation depicted in (b) after some time has passed



The lattice model of reptation

Centre of mass self-diffusion coefficient:

$$D_G = \frac{K_B T}{3N^2 \zeta} \left(\frac{a^2}{b^2} \right)$$



$$D_G \propto M_w^{-2}$$

The self-diffusion constant of a molecule in a polyethylene melt. The two straight sections have slopes -1 and -2.