



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ



Εβδομαδιαίο Σεμινάριο

## Χρήση του μοντέλου Gauss αλυσίδων για υπολογισμό ιδιοτήτων μακρομοριακών νανοκατασκευών

**Μάριος Κοσμάς**

*Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων*

Παρουσιάζεται το μοντέλο Gauss περιγραφής μεγάλων αλυσίδων και η δυνατότητα εύρεσης μέσω μακροσκοπικών ιδιοτήτων πολυμερικών αλυσίδων και συγκροτημάτων τους. Σημαντικές ιδιότητες των πολυμερικών κατασκευών είναι ο ελεύθερος όγκος που περικλείουν ο οποίος χαρακτηρίζει την δυνατότητα και τον βαθμό συγκράτησης μικρότερων ειδών και τα ανοίγματα στην επιφάνειά τους τα οποία χαρακτηρίζουν την δυνατότητα εισόδου των μικρότερων ειδών στο εσωτερικό τους. Το απλούστερο τρισδιάστατο συγκρότημα είναι το πυραμοειδές που αποτελείται από έξι γραμμικές αλυσίδες ενωμένες σε κόμβους των τριών αλυσίδων. Υπολογίζουμε τον ελεύθερο όγκο και την ελεύθερη επιφάνεια του συγκροτήματος αυτού καθώς και την πυκνότητα μάζας του και περιγράφουμε την δυνατότητα επέκτασης της τεχνικής και σε πιο πολύπλοκα νανοσυγκροτήματα.

Τετάρτη 24 Οκτωβρίου 2012, 5:30μμ

Αίθουσα 201α Τμήματος Μαθηματικών

Μετά την ομιλία ακολουθεί καφές και συζήτηση στο εντευκτήριο του Τμήματος