

Materiały polimerowe o złożonej architekturze wewnętrznej znajdują liczne zastosowania w zaawansowanych technologiach, zwłaszcza w powłokach, środkach dyspergujących, w kosmetyce i biomedycynie (nośniki leków). Z uwagi na to pełne zrozumienie procesu syntezy oraz właściwości statycznych i dynamicznych kopolimerów, łańcuchów gwieździście rozgałęzionych, makrocząsteczek dendrytycznych, mikro- i nanożeli o dokładnie założonej strukturze jest niezwykle ważne. Teoretyczne badania polimeryzacji takich układów i przewidywanie ich struktury jest bardzo trudne, zwłaszcza jeśli jej warunki (np. lepkość) zmieniają się dynamicznie podczas tego procesu. Symulacje komputerowe okazują się być odpowiednim i pożytecznym narzędziem do badania takich zagadnień. Odpowiednio dobrane i właściwie zastosowane metody obliczeniowe pozwalają na znalezienie optymalnych parametrów procesu polimeryzacji pożądanych układów i wyznaczenie ich właściwości. Podejście takie pozwoli zaoszczędzić czas eksperymentów i obniżyć ich koszty. Badania złożonych układów makromolekularnych wymagają budowy odpowiednich modeli i zastosowania wydajnych metod obliczeniowych, takich jak model dynamicznej cieczy sieciowej. Ze względu na konieczność bardzo intensywnych i czasochłonnych symulacji (w szczególności procesów dyfuzji) obliczenia zostaną wykonane przy wsparciu dedykowanego, równoległego symulatora ARUZ (*Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych*) dostępnego w BioNanoParku w Łodzi.