

Polimery to związki makrocząsteczkowe powstałe w wyniku połączenia ze sobą wielu powtarzających się elementów – monomerów. Polimery stanowią ważną klasę materiałów należących do tzw. miękkiej materii. Polimery są wszechobecne. Makromolekuły syntetyczne są nieodzownym elementem wielu powszechnie stosowanych materiałów, wliczając w to tworzywa sztuczne, gumy, tekstylia, włókna, żywice, kleje i wiele innych. Wiele z materiałów pochodzenia biologicznego również zawiera polimery. Należą do nich proteiny, kwasy nukleinowe (DNA) oraz polisacharydy (skrobia). Fundamentalne znaczenie dla całej nauki o polimerach ma teoretyczny opis ich konformacji, tj. przestrzennej konfiguracji polimeru oraz ich ewolucji w czasie. Duża grupa własności materiałów polimerowych jest bezpośrednim przejawem własności konformacyjnych pojedynczych makromolekuł.

Głównym celem naukowym tego projektu jest konstrukcja podstaw teoretycznych umożliwiających dostarczenie szczegółowej charakterystyki dynamiki (bio)polimerów w roztworach. W szczególności projekt zakłada opracowanie modeli numerycznych pozwalających zrozumienie własności mikromechanicznych łańcuchów polimerowych poddanych działaniu naprężenia. Symulacje komputerowe umożliwią wyznaczenie relaksacji oraz własności trybologicznych pojedynczych polimerów zarówno w warunkach równowagowych jak i nierównowagowych. Ze względu na fakt, iż wiele własności makroskopowych polimerów jest determinowana przez mikromechanikę pojedynczych łańcuchów polimerowych wnioskowane badania mają istotne znaczenie dla pogłębienia naszej wiedzy o dynamice polimerów oraz są ściśle związane z konkretnymi zastosowaniami z obszaru inżynierii materiałowej oraz biofizyki.