

Węzły to fascynujący temat nie tylko dla matematyków. Okazuje się bowiem, iż węzły oraz sploty, które powstają wskutek wzajemnego splątania ze sobą węzłów, występują również w naturze, na przykład w atmosferze Słońca, gdzie zamknięte linie pola magnetycznego tworzą skomplikowane struktury topologiczne. Struktury te są bardzo istotne dla mieszkańców Ziemi, ponieważ od stopnia ich złożoności zależy, czy linie pola magnetycznego ulegną rekoneksji, czyli rozłączeniu i ponownemu połączeniu, przybierając tym samym nowe kształty. W procesie rekoneksji zostają uwalniane ogromne ilości energii zmagazynowane w polu magnetycznym co prowadzi do zjawiska tzw. Rozbłysków słonecznych, w trakcie których emitowane są potężne strumienie cząstek i fal elektromagnetycznych. Kiedy dotrą one do Ziemi, mogą zakłócić telekomunikację albo zniszczyć stacje transformatorowe. W przestrzeni kosmicznej, zagrażają życiu astronautów. Podobne struktury topologiczne mają istotny wpływ na zachowanie się układów polimerowych, które są tematem niniejszego wniosku. Łańcuchy polimerowe mają kształt długich nitek, które często zamykają się tworząc skomplikowane węzły. Podobnie jak linie pola magnetycznego, splatają się one wzajemnie ze sobą, tworząc sploty, które są nietrywialne z punktu widzenia topologicznego. W biopolimerach, takich jak DNA, topologiczne splątanie jest podyktowane koniecznością upakowania długich nitek DNA, mających długości rzędu metra, w niewielkim obszarze jądra komórki, którego promień ma rozmiary rzędu mikrometrów. Struktury topologiczne mają również istotne znaczenie w przypadku sztucznych materiałów polimerowych. Na przykład, bez uwzględnienia obecności węzłów i splotów nie można opisać w sposób dokładny zachowania elastycznych materiałów polimerowych. Innym efektem węzłów w materiałach polimerowych jest zmniejszenie ich wytrzymałości pod działaniem mechanicznego naprężenia, co może mieć istotne zastosowania w recyklingu. Wiele efektów związanych z właściwościami topologicznymi układów polimerowych udaje się zmierzyć dzięki postępowi technologicznemu, który pozwala na manipulacje pojedynczymi węzłami i prostymi splotami utworzonymi z małej liczby polimerów. Trudniejsze jest wyodrębnienie efektów topologicznych w przypadku materiałów zawierających miliardy polimerów. Celem niniejszego projektu jest właśnie lepsze zrozumienie wpływu takich efektów topologicznych na mechaniczne i termiczne własności materiałów polimerowych. W osiągnięciu celu posłużymy się metodami numerycznymi i analitycznymi. Obecnie, dzięki technikom obliczeniowym rozwiniętym przez naszą grupę w Szczecinie można rozważać polimery mające cztery tysiące odcinków albo splot, w których dziesięć pierścieni polimerowych, każdy o długości czterystu odcinków, jest splątanych razem. Przy takich długościach, przybliżone modele wykorzystane w niniejszych badaniach stają się realistyczne. Można na przykład zaobserwować powstanie struktur krystalicznych w układzie podobne do tych, które pojawiają się wplątkach śniegu. Istotną cechą projektu jest to, że po raz pierwszy badane będą sploty polimerowe zawierające stosunkowo dużą liczbę (do dziesięciu) splątanych ze sobą węzłów. Do chwili obecnej, poznano głównie własności fizyczne pojedynczych węzłów. Pytania, na które projekt dostarczy odpowiedzi są obiektem dużego zainteresowania zarówno w biofizyce jak i w inżynierii materiałowej. Za pomocą splotów można zbudować siatki albo małe „worki”, wewnątrz których można umieszczać leki. Jakie będą własności termiczne takich worków i siatek? Ponadto, jaka będzie wytrzymałość splotów polimerowych na naprężenia mechaniczne jeżeli zostaną one rozciągnięte przez zewnętrzne siły mechaniczne? W jakiej części tego układu pojawią się największe naprężenia? Jest to ważne zagadnienie, które trzeba rozwiązać, jeżeli chcemy przewidzieć gdzie w materiałach polimerowych może nastąpić pęknięcie. W końcu, czy można dostroić efekty topologiczne w taki sposób, aby otrzymać materiały z pożądanymi cechami? Celem projektu jest odpowiedzenie na wszystkie te pytania oraz rozwinięcie innowacyjnych technik numerycznych i analitycznych, które będą ważne nie tylko w fizyce polimerów, ale także w innych dziedzinach, wszędzie tam gdzie efekty topologiczne są istotne.