**Nanobastões Janus em interfaces poliméricas: uma abordagem computacional em mesoescala**

**Felipe Paiva1,2,3, Shaghayegh Khani2, João Maia2, Argimiro Secchi1, Veronica Calado1**

**1Universidade Federal do Rio de Janeiro**

**2Case Western Reserve University**

**3Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro**

fpaiva@lmmp.mec.puc-rio.br

RESUMO:

Nanopartículas anfifílicas do tipo Janus tem chamado a atenção da comunidade científica internacional como uma alternativa no desenvolvimento de materiais poliméricos. Por serem mais interfacialmente ativas que copolímeros em bloco, partículas Janus são promissoras para a construção de interfaces funcionais ou como compatibilizantes de blendas poliméricas [1]. Sendo ainda uma tecnologia incipiente e onerosa economicamente, estudos computacionais da microestrutura, dinâmica, e do comportamento de nanopartículas Janus em blendas de polímeros imiscíveis se fazem especialmente úteis. Neste trabalho, o comportamento de nanobastões Janus em blendas poliméricas sob equilíbrio, cisalhamento, e subsequente relaxação foi prospectado por meio de simulações em mesoescala de Dinâmica Dissipativa de Partículas. Para condições bastante realistas em relação a processamento de polímeros, observa-se que a orientação de nanobastões Janus (razão de aspecto 2.0 e 4.0) pode ser controlada interfacialmente. A agregação, difusão, e organização de nanobastões Janus também podem ser controladas a partir do número/tamanho de cadeias poliméricas enxertadas. Partículas Janus também oferecem um controle maior da morfologia de blendas de proporção relativa 15:85 quando é cessado o escoamento e quando comparadas a nanopartículas homogêneas. Esses resultados esclarecem melhor e de uma forma barata e rápida como se dariam os mecanismos de compatibilização de blendas poliméricas por partículas Janus..

**Palavras- chave**: *Blendas; Nanopartículas Janus; Dinâmica Dissipativa de Partículas.*

REFERÊNCIAS:

Exemplo:

[1] PAIVA, F; SECCHI, A; CALADO, V; MAIA, J; KHANI, S. Slip and momentum transfer mechanisms mediated by Janus rods at polymer interfaces. Soft Matter, v. 16, n. 28, p.6662-6672, 2020.