

Contenido archivado el 2024-06-18



# Multi-Scale Modeling of Nano-Structured Polymeric Materials: From Chemistry to Materials Performance

## Resultados resumidos

### Modelos de materiales desde el átomo al compuesto

El desarrollo racional de materiales con nuevas funciones se basa en gran medida en modelos matemáticos sofisticados. Científicos financiados por la Unión Europea desarrollaron simulaciones multiescala aplicables a multitud de sistemas innovadores.



© Thinkstock

Los materiales poliméricos, entre los que se encuentran los omnipresentes plásticos, han sido la piedra angular de una variedad virtualmente infinita de productos y componentes que van desde la electrónica de consumo hasta instrumentos espaciales. Combinando los plásticos con la nanotecnología, los compuestos poliméricos rellenos de nanopartículas (NP) podrían revolucionar este campo.

Una comprensión detallada de la relación estructura-función y del control de la dispersión de las NP en la matriz de polímero es esencial. Los indicios disponibles sugieren que las NP pueden disminuir la viscosidad permitiendo una versión rentable

del proceso de moldeo por inyección. Las NP también tienen interesantes propiedades térmicas, mecánicas, eléctricas y magnéticas que podrían dar lugar a productos nuevos e innovadores siempre que sea posible controlar la interacción partícula-matriz.

Los científicos iniciaron el proyecto «Multi-scale modeling of nano-structured polymeric materials: From chemistry to materials performance» (NANOMODEL), financiado por la UE, para proporcionar las herramientas de modelado necesarias. El éxito del proyecto es el resultado de una fructífera colaboración en las capas de modelado multiescala, así como en un ciclo de intercambio de información sobre los experimentos y la validación de los modelos. Los científicos sintetizaron y caracterizaron polímeros de interés industrial con NP integradas de superficie modificada. Los datos se introdujeron en los modelos en desarrollo y se modificó un software comercial con los desarrollos metodológicos pertinentes.

La comparación de las caracterizaciones experimentales de los materiales con los resultados del modelo demostró el éxito de los métodos de simulación aplicados para describir el comportamiento de los nanocompuestos. Por otra parte, el esquema de acoplamiento basado en el método de elementos finitos de dinámica molecular (MD-FEM) creado puede erigirse en una herramienta importante para el desarrollo racional de materiales.

## Descubra otros artículos del mismo campo de aplicación



Máquinas mejoradas para fabricar materiales compuestos

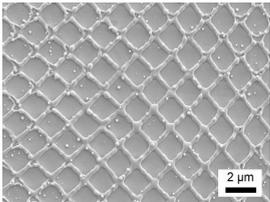


Material minúsculo, gran problema: evaluar el impacto de los contaminantes nanocompuestos





## El camino circular hacia la sostenibilidad de la industria de la confección y del sector pesquero



## Novedades acerca de LAMPAS: mantener los electrodomésticos impecables con tecnología láser



### Información del proyecto

#### NANOMODEL

Identificador del acuerdo de subvención:  
211778

[Sitio web del proyecto](#)

Proyecto cerrado

**Fecha de inicio**  
1 Noviembre 2008

**Fecha de finalización**  
31 Octubre 2011

#### Financiado con arreglo a

Specific Programme "Cooperation": Nanosciences, Nanotechnologies, Materials and new Production Technologies

#### Coste total

€ 5 042 793,33

#### Aportación de la UE

€ 3 481 149,00

Coordinado por  
BASF SE  
 Germany

Este proyecto figura en...

REVISTA RESEARCH\*EU

**Results Supplement No.  
032 - Robots and us:  
advances in robotics,  
from industry to society**

**Última actualización:** 15 Diciembre 2010

**Permalink:** <https://cordis.europa.eu/article/id/85877-material-models-from-the-atom-to-the-composite/es>

European Union, 2025