

## Formulár ZK - Záverečná karta projektu

Riešiteľ: Jozef Krištiak	Evidenčné číslo projektu: APVT-51-045302
Názov projektu: Voľný objem v molekulových a polymérnych systémoch a ich transportné a dynamické vlastnosti	
Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:	Fyzikálny ústav SAV
	Ústav polymérov SAV
Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):	University of Pisa, Taliansko; US Naval Academy, Annapolis, USA
	Silesian University, Katowice, Poľsko
	Universita Di Firenze, Florencia, Taliansko
Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:	
Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uveďte i publikácie prijaté do tlače alebo pripravované):  <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	Bendler, J.T., Fontanella, J.J., Shlesinger, M.F., Bartoš, J., Šauša, O., Krištiak, J. <b>Free-volume dynamics in glasses and supercooled liquids</b> (2005) <i>Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics</i> , 71 (3), art. no. 031508, pp. 031508/1-031508/10.
	Bartoš, J., Šauša, O., Račko, D., Krištiak, J., Fontanella, J.J. <b>Positron annihilation lifetime response and relaxation dynamics in glycerol</b> (2005) <i>Journal of Non-Crystalline Solids</i> , 351 (33-36 SPEC. ISS.), pp. 2599-2604.
	<b>O. Šauša, J. Krištiak, D. Berek, M. Iskrová Column packings for high-performance liquid chromatography and positron annihilation lifetime spectroscopy</b> (2007) <i>Radiation Physics and Chemistry</i> 76 (2), pp. 271-274
	Pawlus, S., Bartoš, J., Šauša, O., Krištiak, J., Paluch, M. <b>Positronium annihilation lifetimes and dielectric spectroscopy studies on diethyl phthalate: Phenomenological correlations and microscopic analyses in terms of the extended free volume model by Cohen-Grest</b> (2006) <i>Journal of Chemical Physics</i> , 124 (10), art. no. 104505.
	Bartoš, J., Andreozzi, L., Faetti, M., Šauša, O., Račko, D., Krištiak, J. <b>Free volume in poly(propylene glycol) and its relationships to spin probe reorientation</b> (2006) <i>Journal of Non-Crystalline Solids</i> , 352 (42-49 SPEC. ISS.), pp. 4785-4789.
V čom vidíte uplatnenie výsledkov tohto projektu:	1) Vývoj nových náplní do chromatografických kolon 2) Vývoj akumulátorov s tuhými polymérnymi elektrolytmi

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas ku zverejneniu údajov v nej uvedených.

Podpis riešiteľa: .....

Dátum: ..29.1.2007 .....

# Charakteristika výsledkov

Evidenčné číslo: 51-045302

## Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

Boli merané charakteristiky anihilačného procesu pozitronov na vzorkách oligomérov propylenglykolu, glycerolu, diethylphthalatu ako aj polypropylen-glykolu s prísadami solí lítia a sodíka. Na týchto vzorkách boli urobené i merania vodivosti resp. dielektrickej spektroskopie. Experimentálne výsledky sa použili na testovanie modelov popisujúcich dynamiku sklo-tvorných kvapalín.

Štrukturálne a kinetické procesy, ktoré sú u podchladených kvapalín v blízkosti teploty sklovenia  $T_g$ , sa dajú popísať modelom difúzie defektov (MDD). Tieto defekty sa dajú chápať ako pohyblivé zoskupenia (klastre) voľných objemov detekovaných pozitroniom. Klastre defektov interagujú a difundujú v teplotách vyšších ako  $T_g$ . Schopnosť modelu DD popísať rôzne experimentálne výsledky ukazuje na významnú úlohu voľného objemu v dynamike podchladených kvapalín.

Boli urobené simulácie štruktúry glycerolu a propylenglykolu metódami molekulárnej dynamiky a následnej analýzy voľného objemu. Simulácie sú schopné zachytiť niektoré obecné charakteristiky voľného objemu.

Ciele projektu boli dosiahnuté. Začali sa robiť i nové experimenty umožňujúce skúmať dynamiku molekúl uväznených v nano-objemoch.

## Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

The characteristics of positron annihilation process on samples of propyleneglycol oligomers, glycerol, diethyl phthalate and poly (propylene glycols) doped by Li and Na salts have been measured. The conductivity and dielectric spectroscopy measurements on these samples were applied to test several theoretical models used to description of glass-forming liquids.

The best description of data was achieved by the defect diffusion model (DDM). It can be used to interpret structural and kinetic changes which occur near the glass transition temperature  $T_g$  for glasses and super cooled liquids. Mobile packets of free volume detected by positronium behave as interacting defects in super cooled liquids and experience an intermittent diffusion throughout the system above  $T_g$ .

The results indicate the important role of free volume in control of dynamics of super cooled liquid.

The significance of free volume information from positronium decay was tested by means of molecular dynamics simulation followed by an appropriate free volume analysis of the generated microstructures. Such modeling is able to catch-up some general features of free volume.

The project aims were achieved new class of experiments to understand dynamics of finite number of molecules confined in nano-pores were started.

Podpis riešiteľa: .....