

# Vliv kvality rozpouštědla na strukturní a konformační chování polymerních kartáčů

Lukáš Michalec  
PřF UJEP



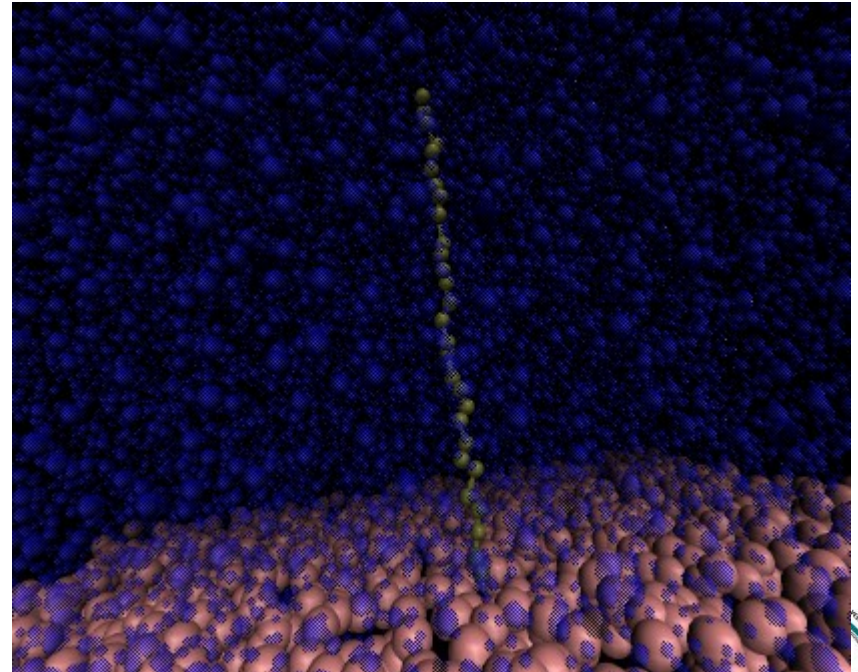
# Osnova

- Co je polymerní kartáč
- Počáteční podmínky polymerního kartáče
- Způsoby měření strukturních a konformačních chování
- Naměřené výsledky

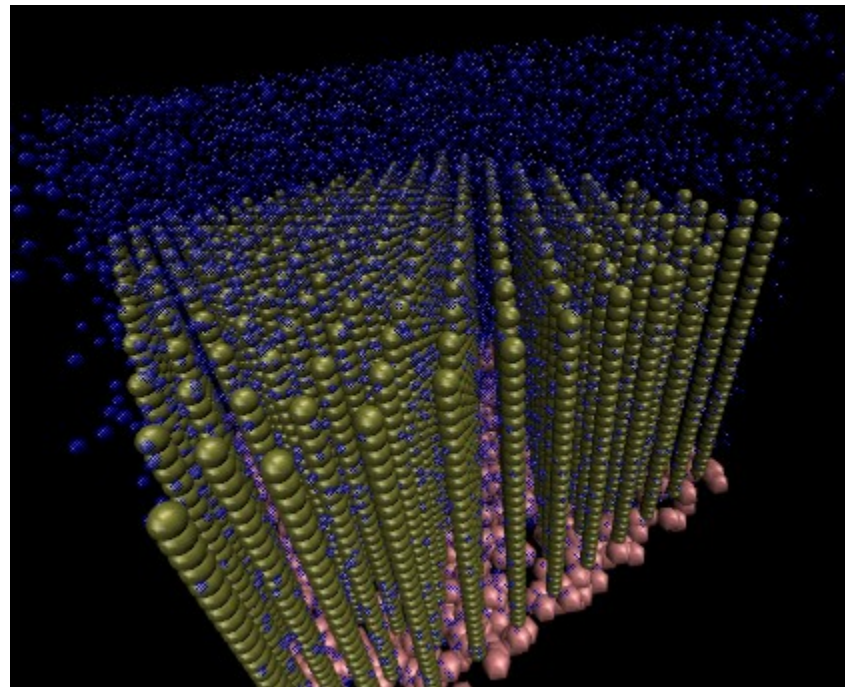
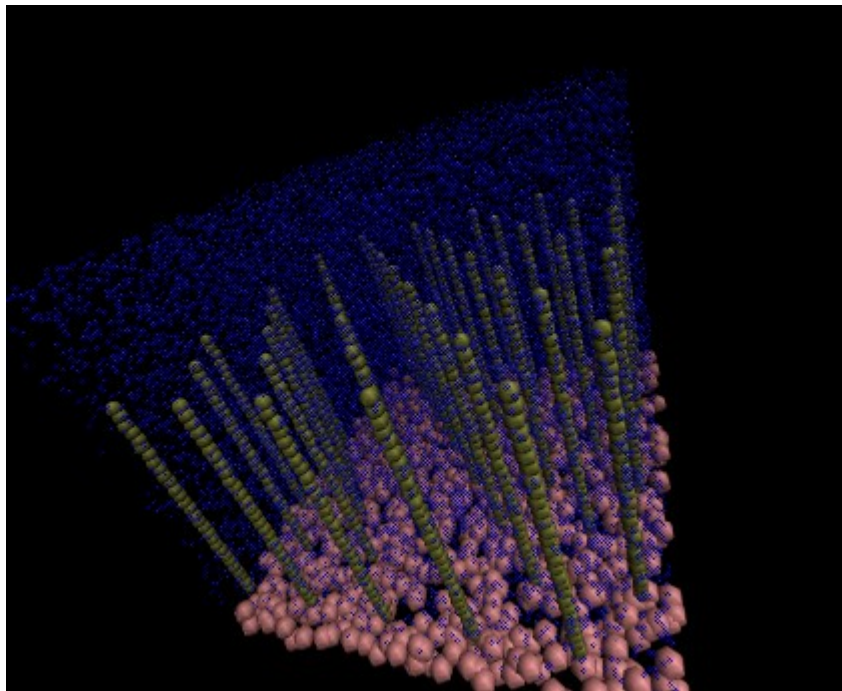


# Co je polymerní kartáč

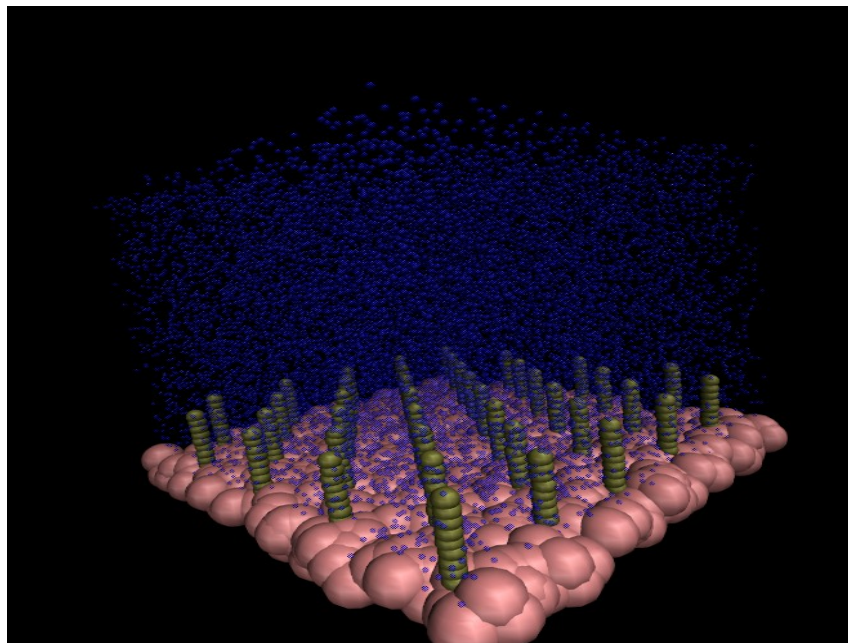
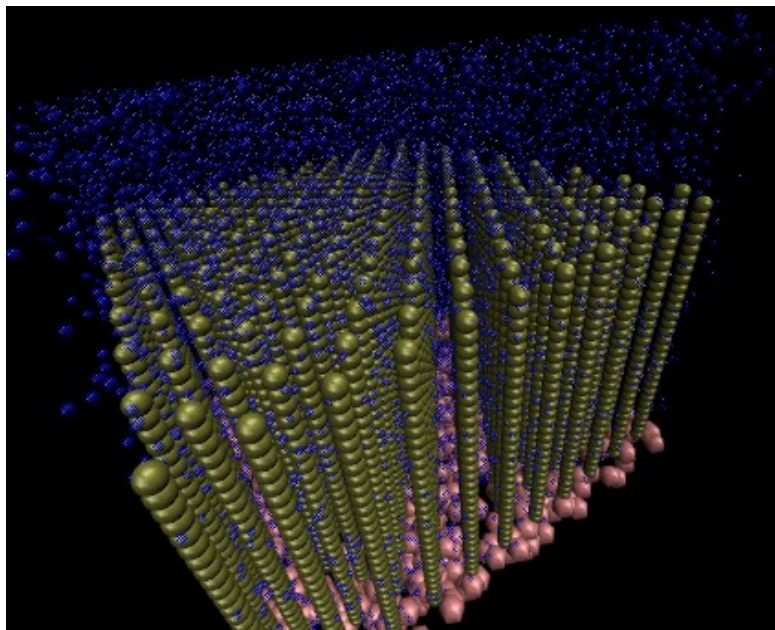
- Polymerní řetízek  
(jeden a více)
- Uchycený na povrchu
- Rozpouštědlo



# Různé zahuštění

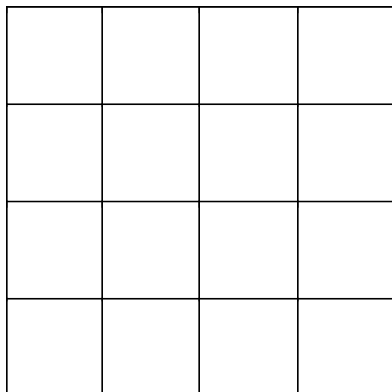


# Různé délky



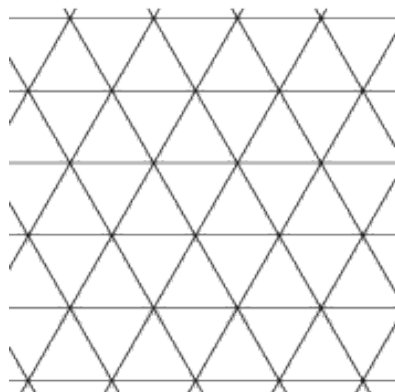
# Rozmístění polymerů

- Pravoúhlé



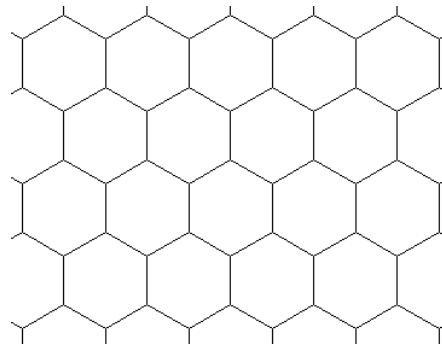
<http://mathforum.org/alejandre/magic.square/4x4grid.gif>

- Trojúhelníkové



[http://mathworld.wolfram.com/images/eps-gif/TriangularGrid\\_700.gif](http://mathworld.wolfram.com/images/eps-gif/TriangularGrid_700.gif)

- Šestiúhelníkové



<http://keekercd.com/wp-content/uploads/2011/03/HexGridLandscapeBase.png>

- Náhodné

# Další počáteční podmínky

- Síla a typ vazby v polymeru
- Velikost interakce (solvent -> polymer)
- Speciální podmínky (proudění)



# Strukturní vlastnosti

- Gyrační poloměr 
$$s = \left( \frac{\sum_{i=1}^n m_i \cdot r_i^2}{\sum_{i=1}^n m_i} \right)^{1/2}$$
- Vzdálenost konců řetízku
- Hustotní profil





# Konformační vlastnosti

- Asphercity (nekulatost)
- Acylindricity (neválcovatost)
- Nematic order parameter (uspořádanost)



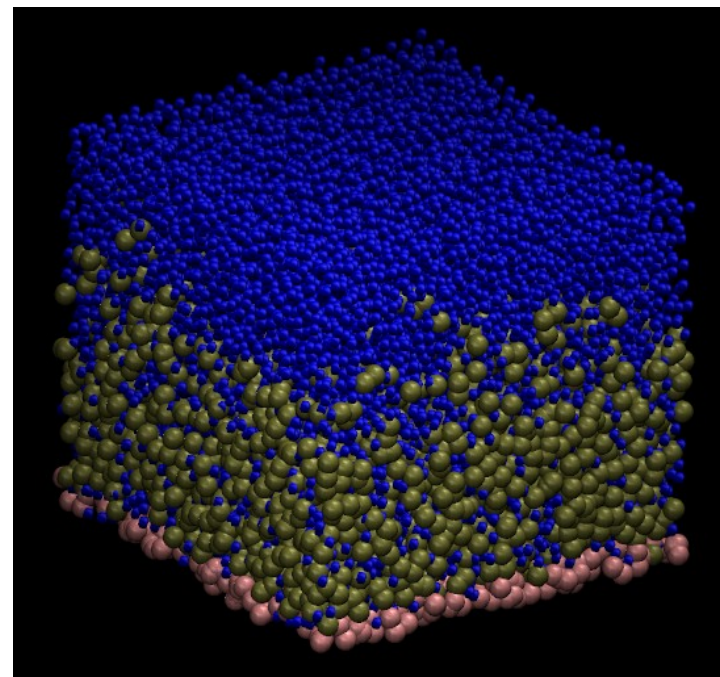
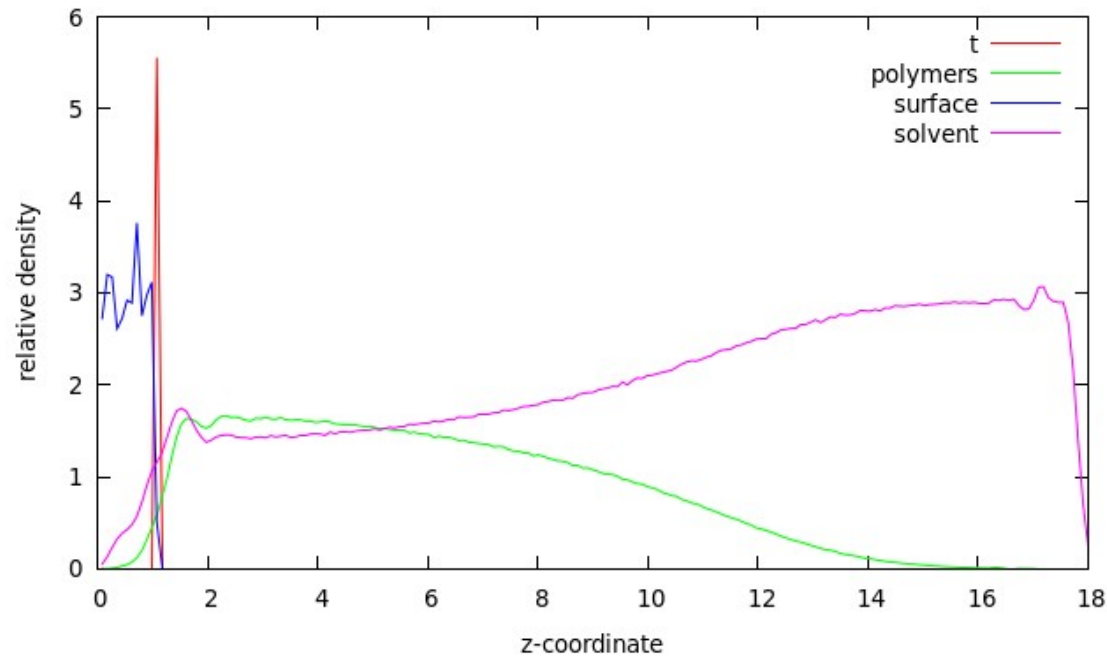
# Naměřené výsledky

- Počáteční podmínky

Počet iterací:	1 000 000
Simulační box:	20x20x18
Teplota	1.0
<b>Homopolymer</b>	
Délka:	30 beadů
Vazby:	Harmonické (síla 4)
Povrchová hustota:	0.5
Interakce s rozpouš.:	25 a 45

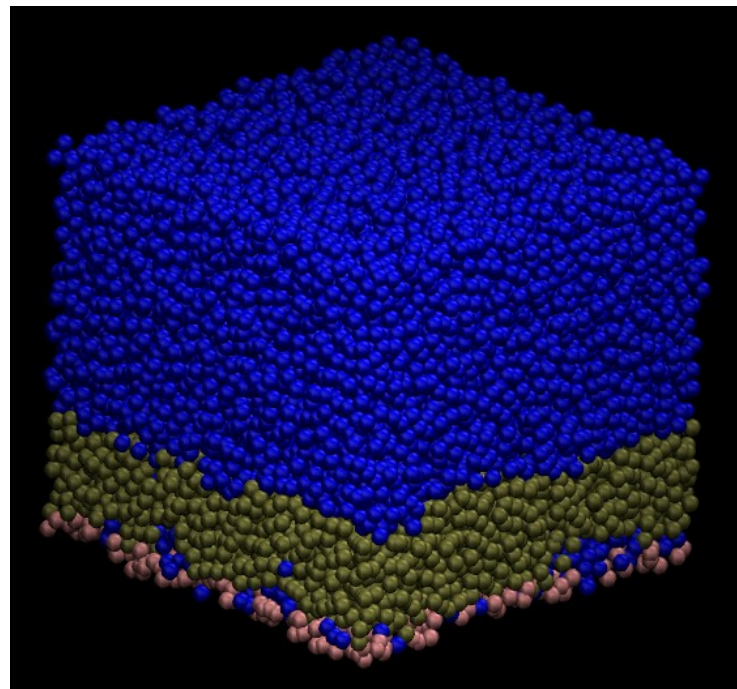
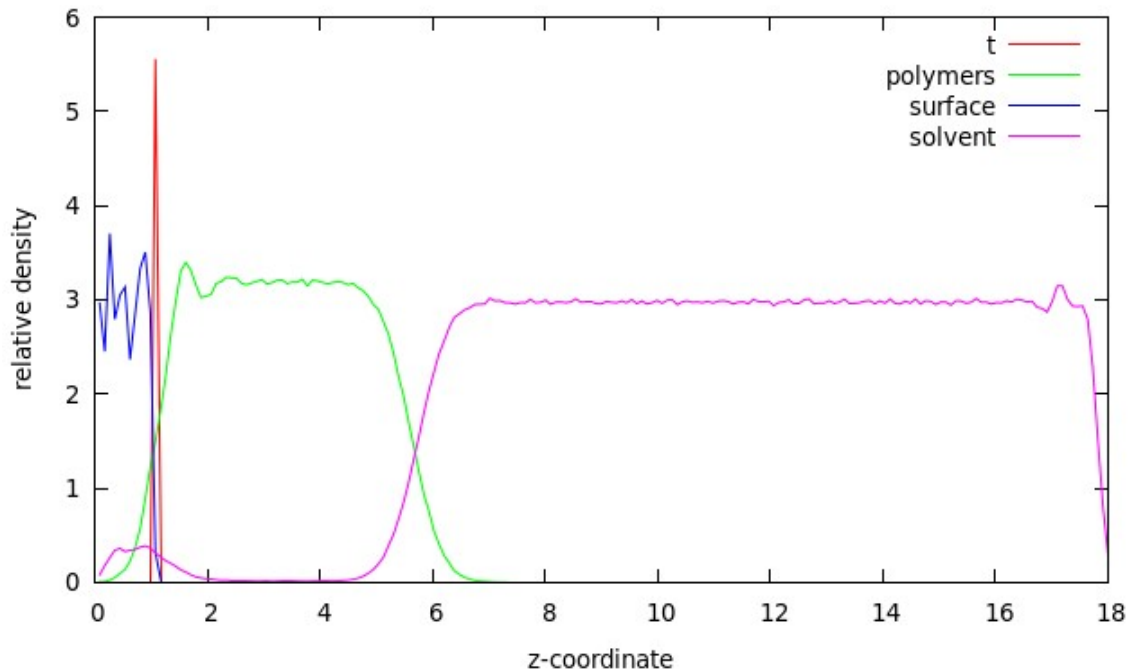
# Naměřené výsledky

Simulace polymerního kartáče s velkým zahuštěním.  
Solvent (25)



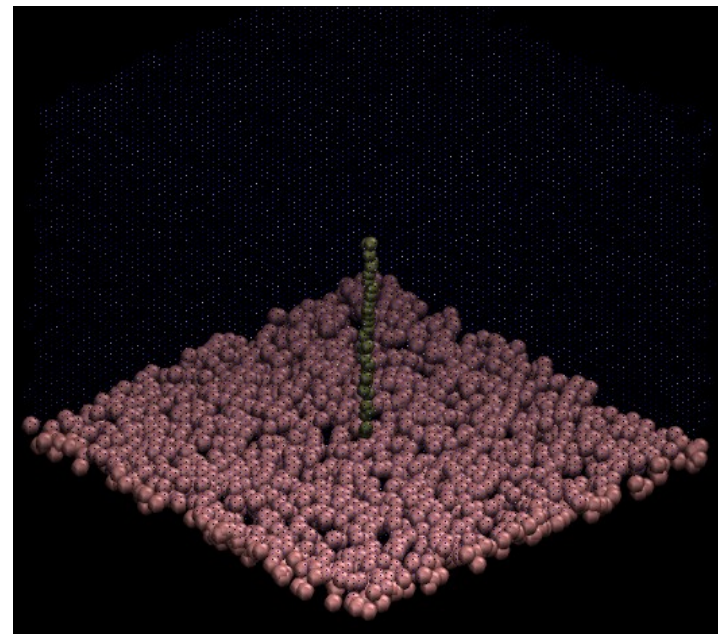
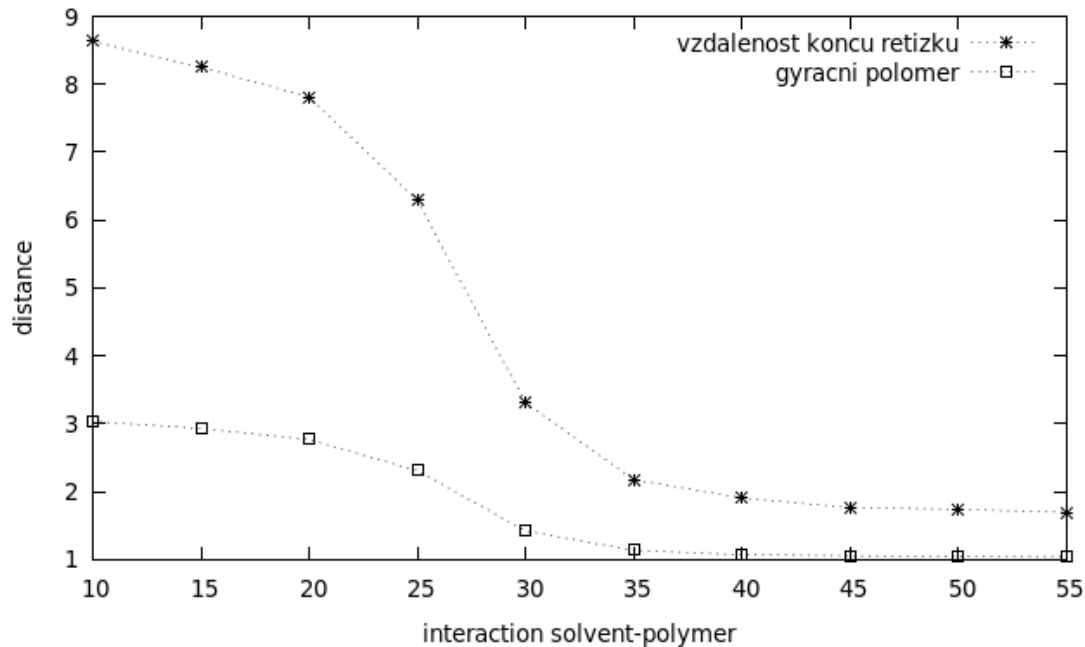
# Naměřené výsledky

Simulace polymerního kartáče s velkým zahuštěním.  
Solvent (45)



# Naměřené výsledky

Simulace samostatného řetízku a měření strukturních vlastností v závislosti na kvalitě rozpouštědla.



# Použitý software

- DL\_Meso - simulační nástroj
- VMD - vizualizační nástroj
- GNUPlot - nástroj na vytváření grafů

