

Konformace polárních polymerů v elektrickém poli

J. Chvojka, K. Vodsed'álková, P. Mikeš

D. Lukáš

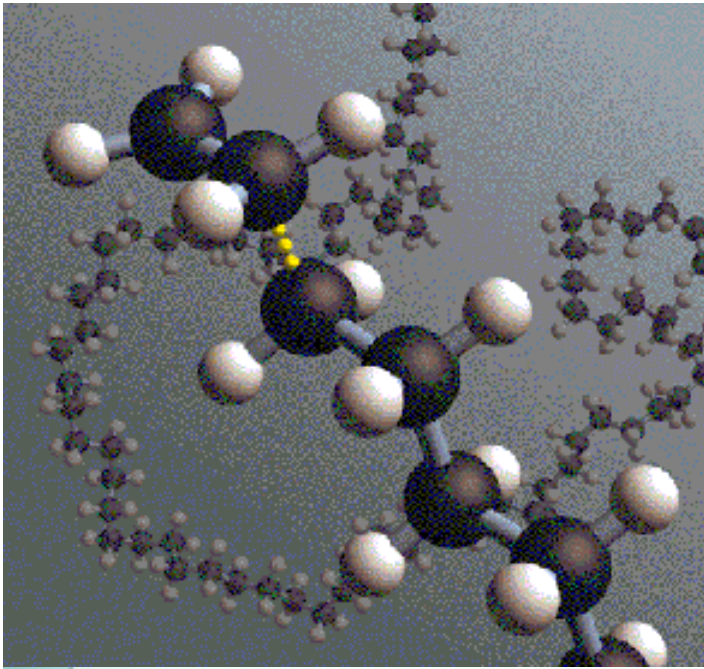
Conformational behaviour of polar polymer models
under electric field

H. Schiessel, G. Oshanin, A. Blumen

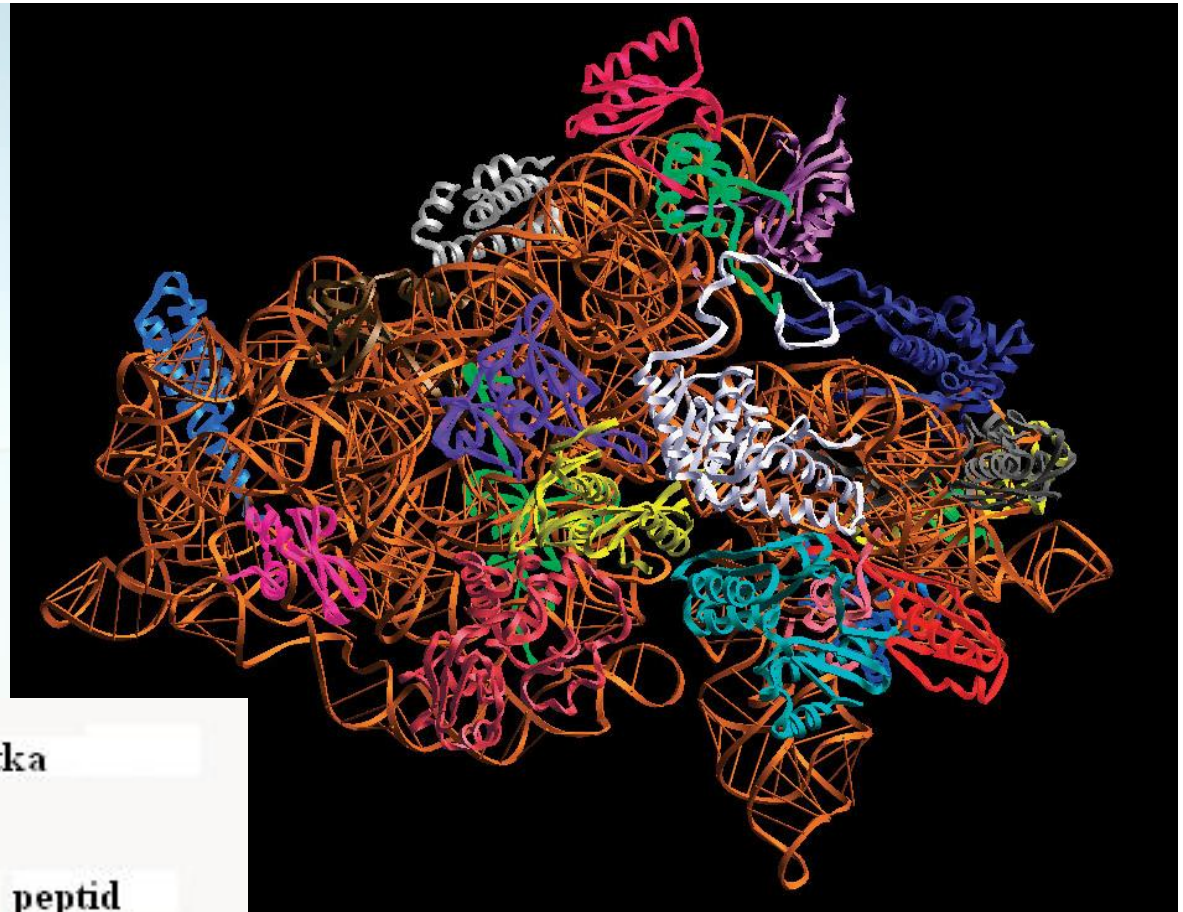
Chemical physics Letters, **378** (2003) 142-147

Úvod

- Základní pojmy
- Definice podstaty chování polymeru v elektrickém poli
- Porovnání obou simulací

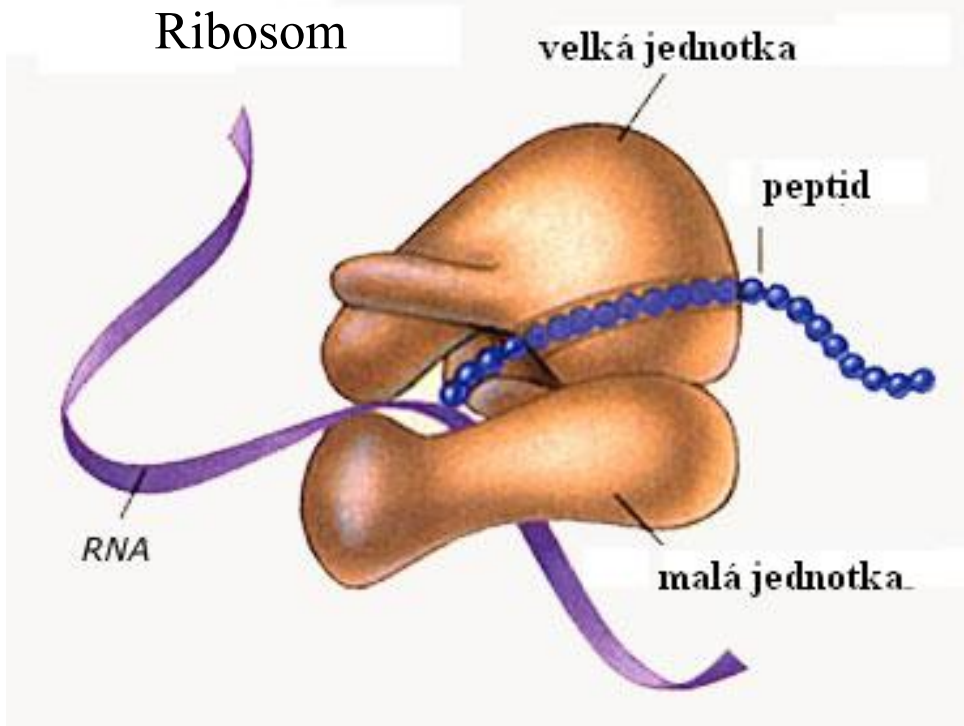


Ribosom

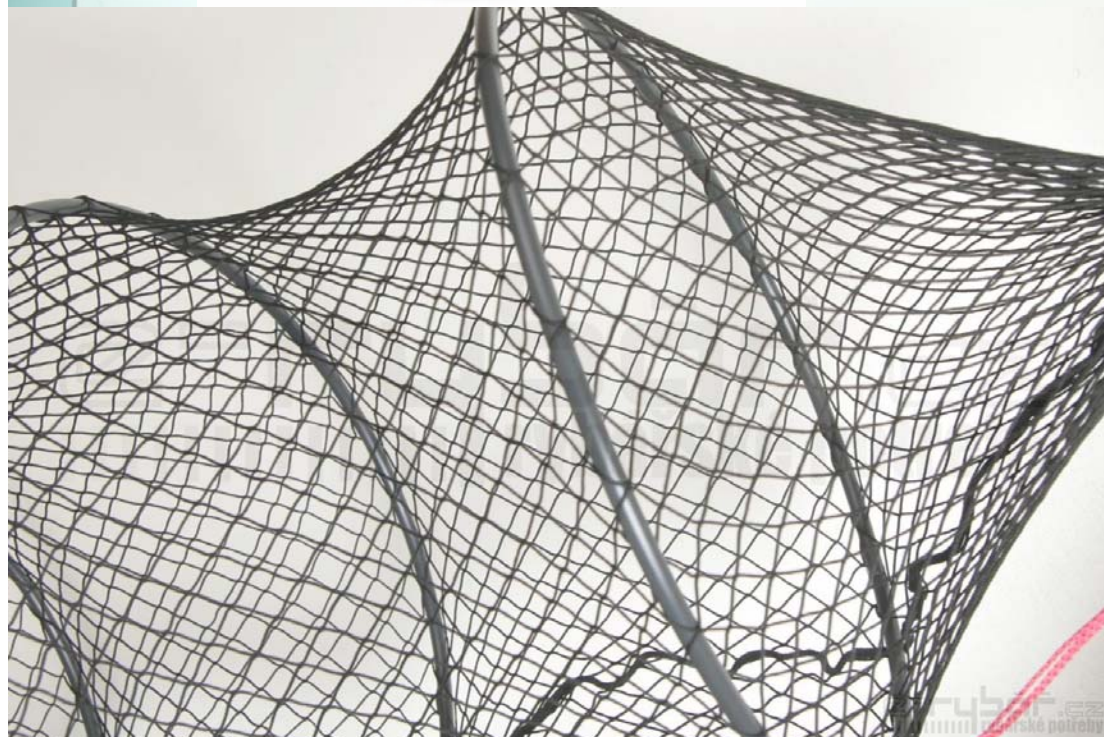


Konformace

prostorové uspořádání
jednotlivých atomů v
molekule (polymeru).

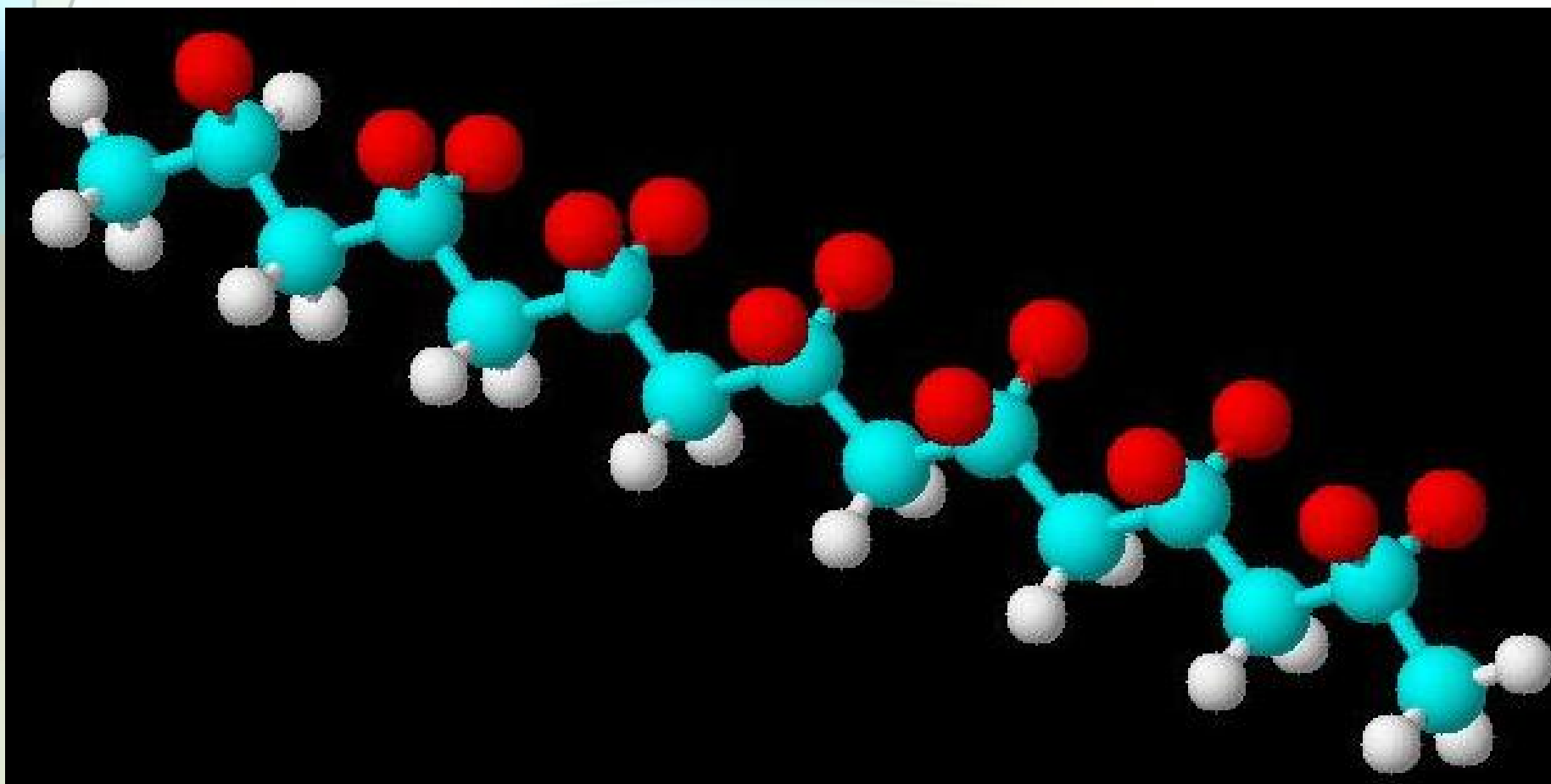
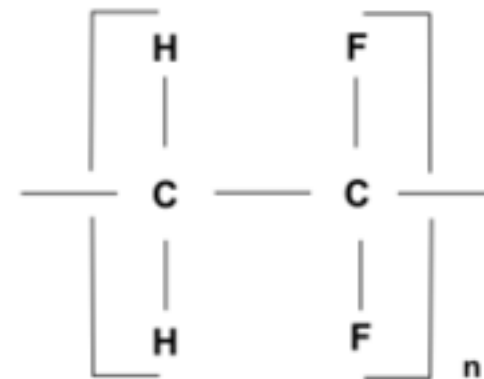


Konformace: nástroje z vláknitých útvarů.

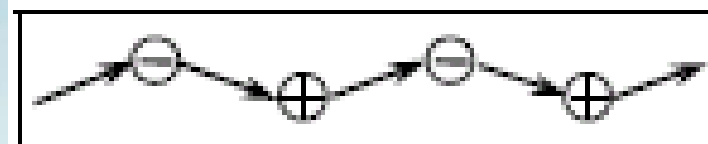


Základní pojmy

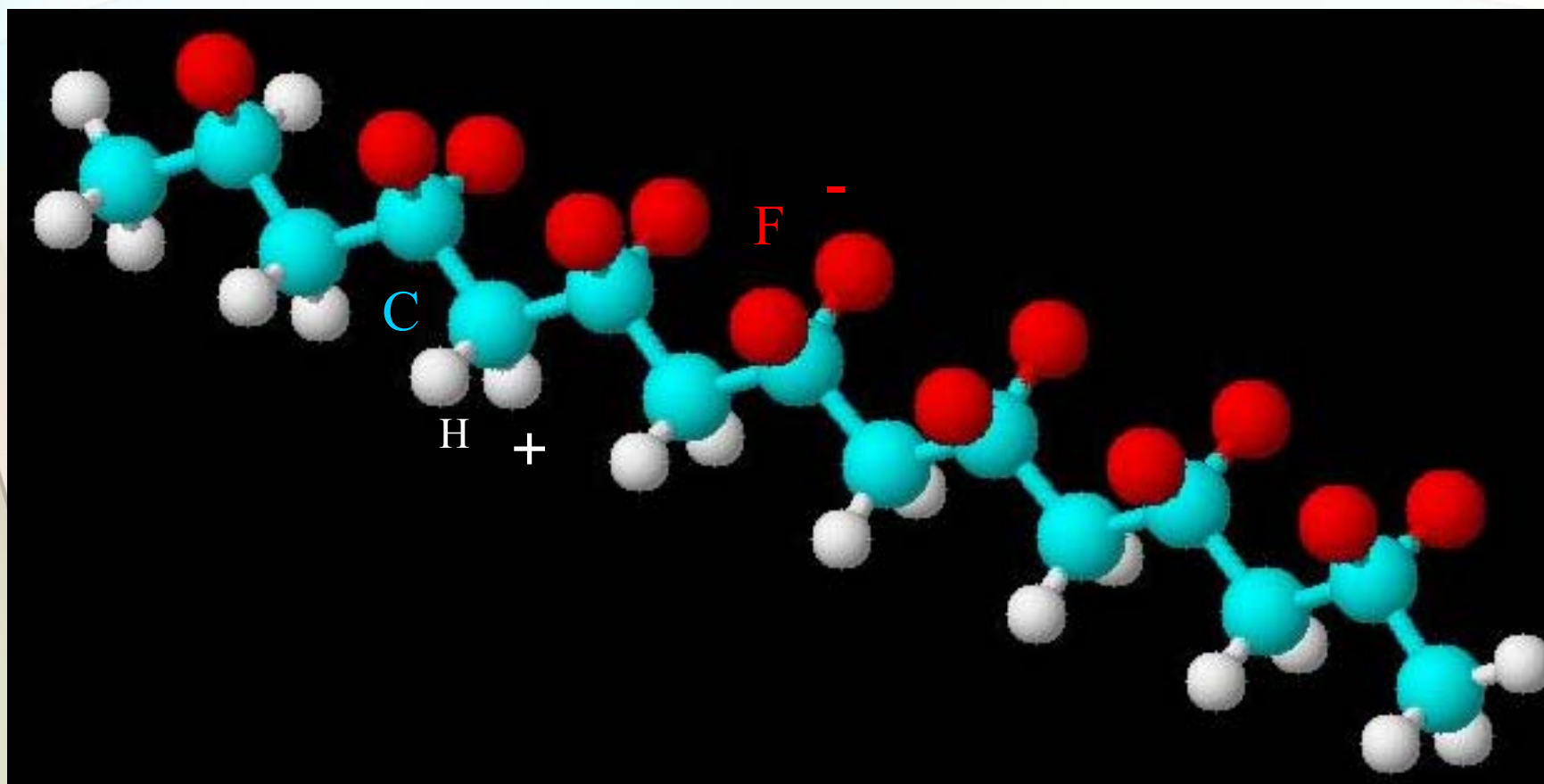
Poly(vinylidene fluorid)



Polyamfolyt



je chemická sloučenina, která obsahuje jak negativně tak pozitivně nabité monomery na hlavním molekulovém řetězci.

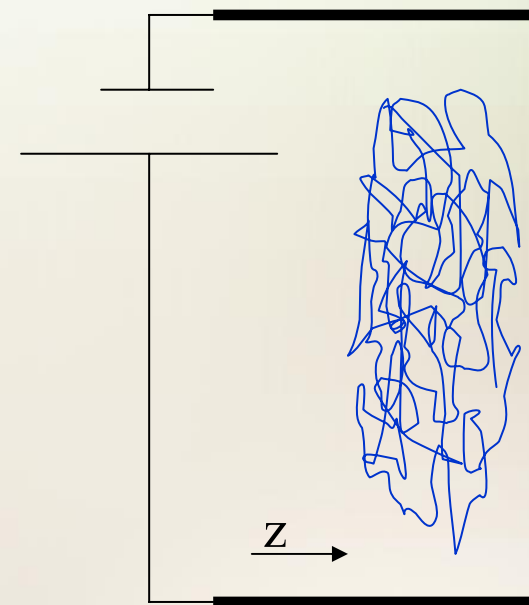


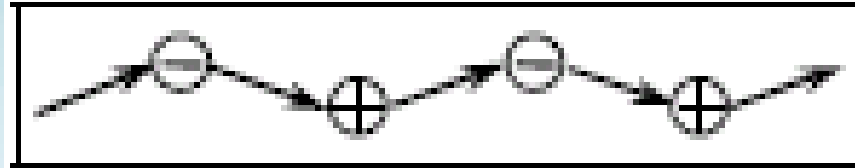
- Teoretické modely konformačních vlastností polymeru, který je vystaven vnějšímu elektrickému poli. Schiessel a kolektiv, Winkler a Reineker kdy slabé interakce mezi nabitými segmenty byly zanedbány.

$$\langle R^2 \rangle = \langle R_0^2 \rangle + \alpha_1 q^2 \varepsilon^2$$

$$\langle R_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle R_0^2 \rangle - \alpha_2 q^2 \varepsilon^2$$

$\uparrow$
 $\xrightarrow{z}$



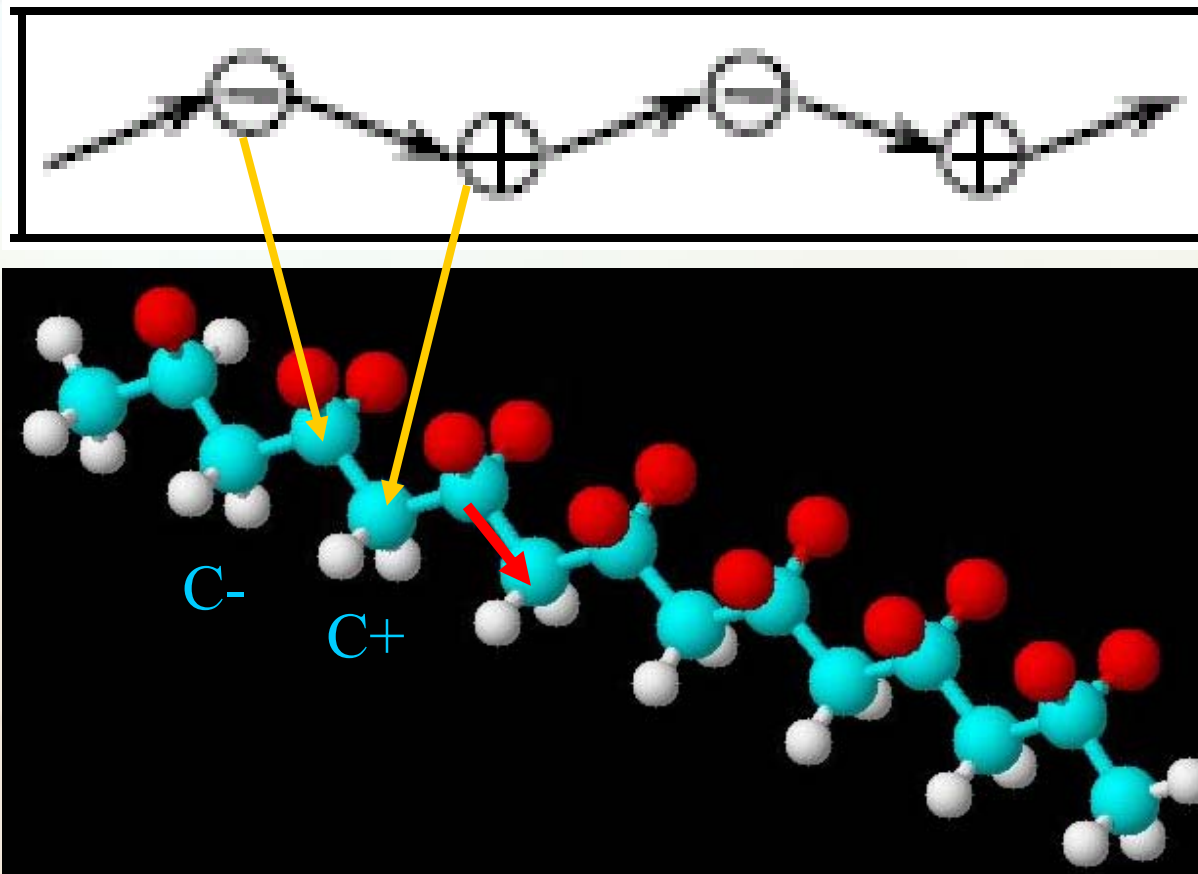


Polyamfolyty poskytují „1d síť“ pravidelně se střídajícími kladnými a zápornými náboji.

Nabízí se možnost zkoumat dva rozdílné modely řetězců, I a II, podle Byrtnera a Smitha.

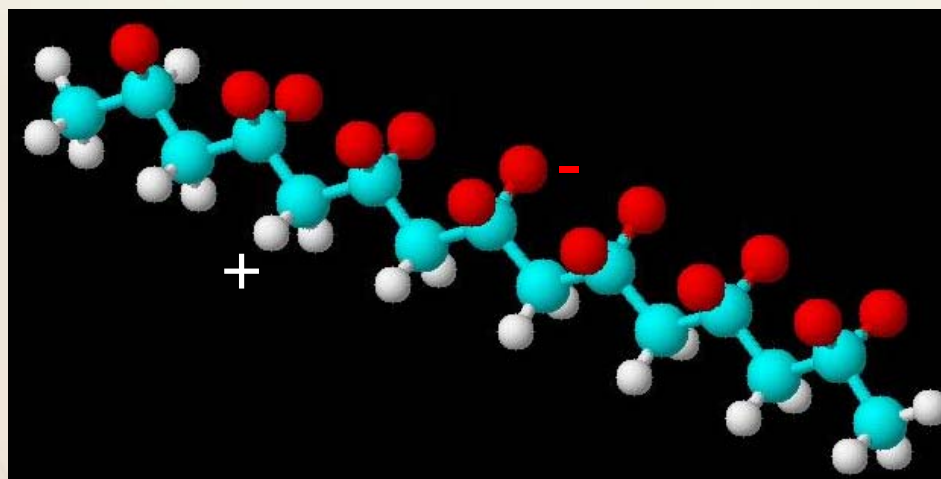
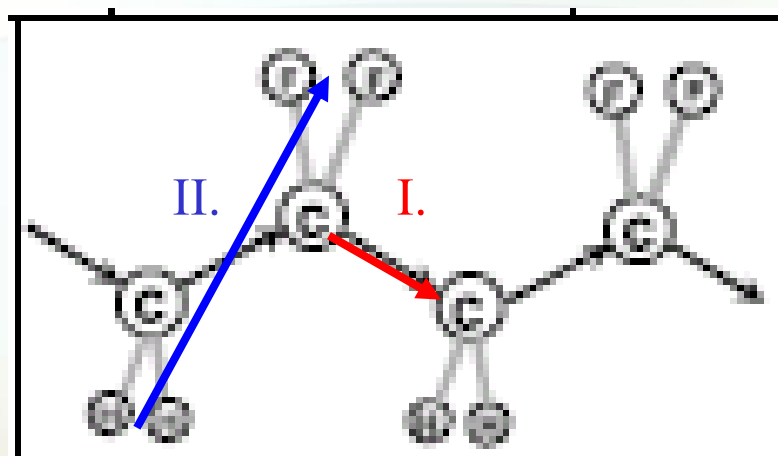
Model I:

- V prvním modelu jsou rozdílné náboje umístěny přímo na páteři řetězce polyamfolytu.

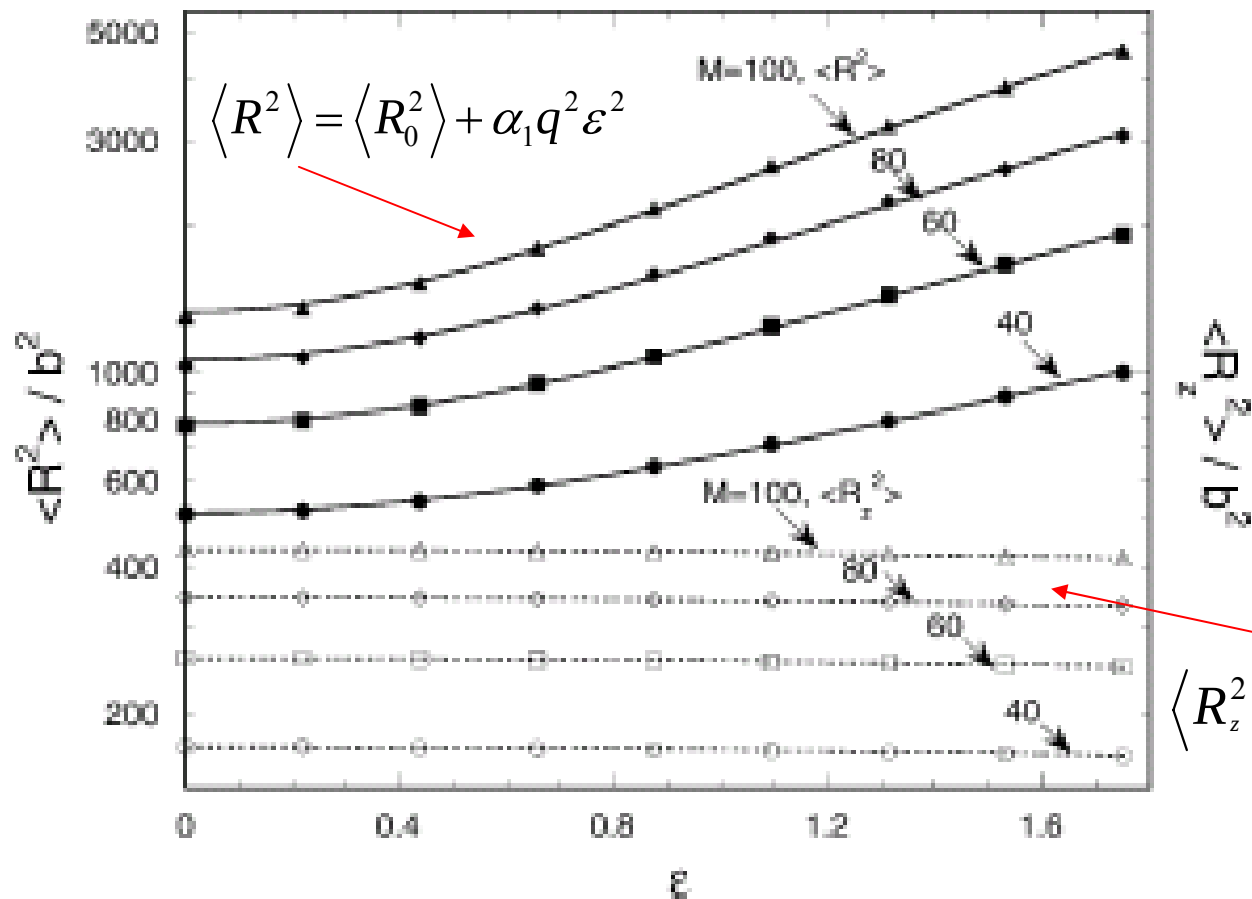


Model II:

- V druhém modelu jsou náboje umístěny mimo páteř řetězce makromolekuly polyamfolytu.



Výsledky simulace pomocí modelů:

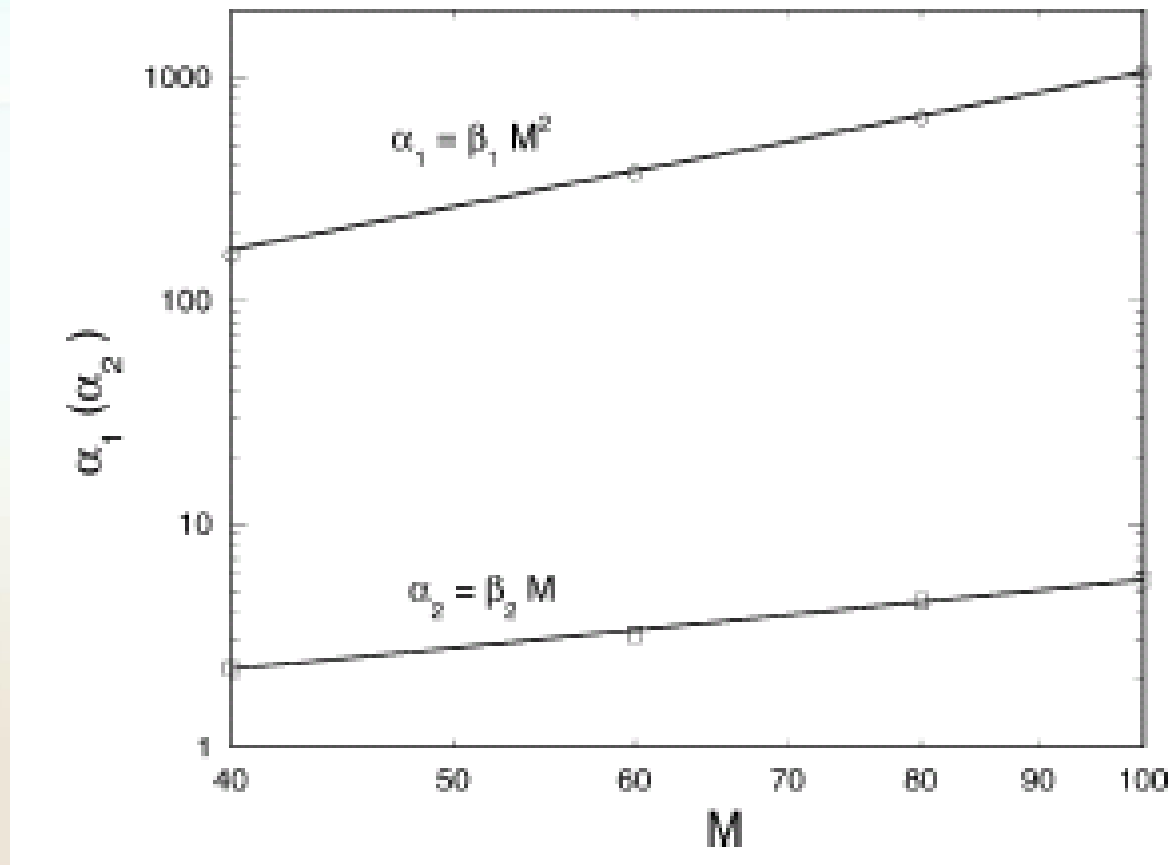


Závislost bezrozměrného kvadrátu koncového

$\langle R^2 \rangle / b^2$ na

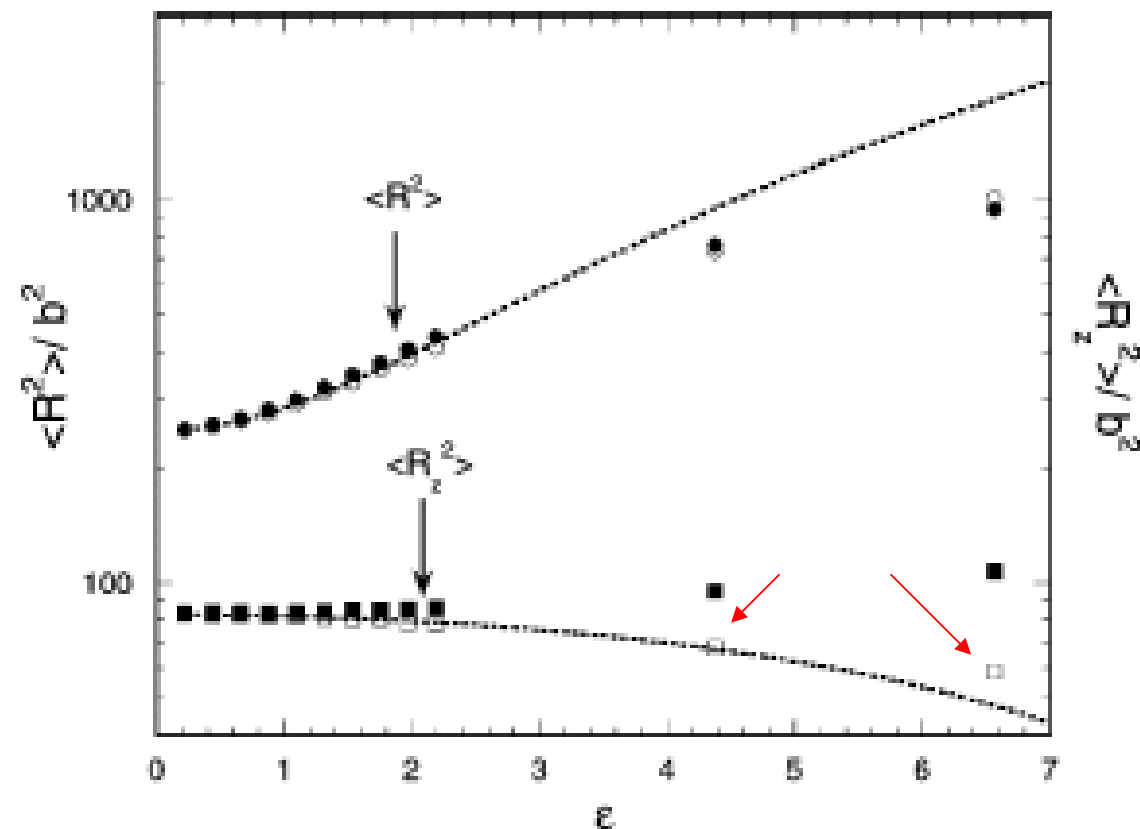
$$\varepsilon = \frac{E_o \cdot e \cdot b}{k \cdot T}$$

- Výsledky simulace se mírně odlišují od analytických předpovědí. Z grafu můžeme získat koeficienty alfa



- $\alpha_1(\alpha_2)$ v závislosti na M (polymerační stupeň)

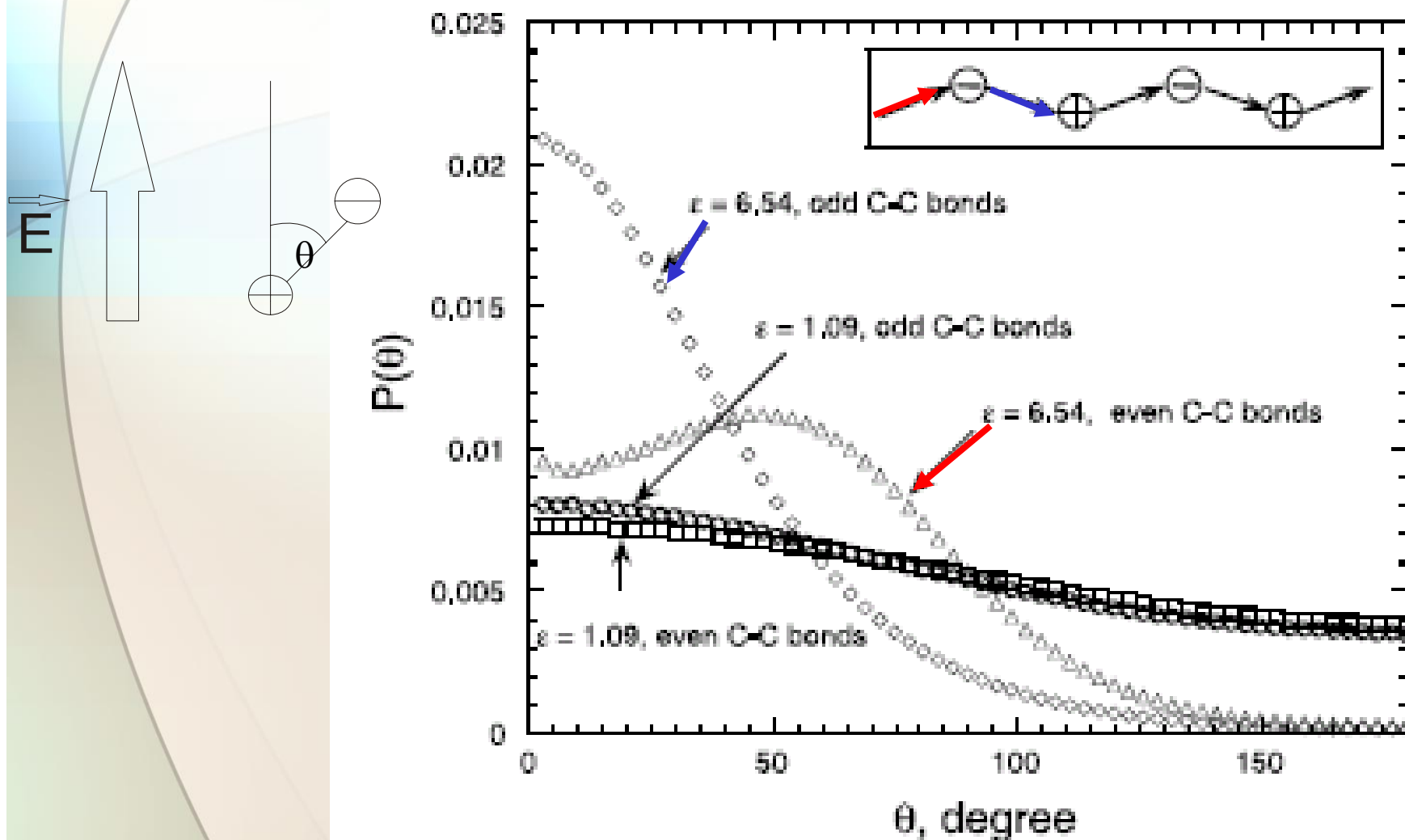
- Variace $\langle R^2 \rangle / b^2$ a $\langle R_z^2 \rangle / b^2$ pro **model I** jsou body vyneseny bíle a pro **model II** jsou body vyneseny černě (plně). Křivky jsou získány pomocí simulace pro **model I**.



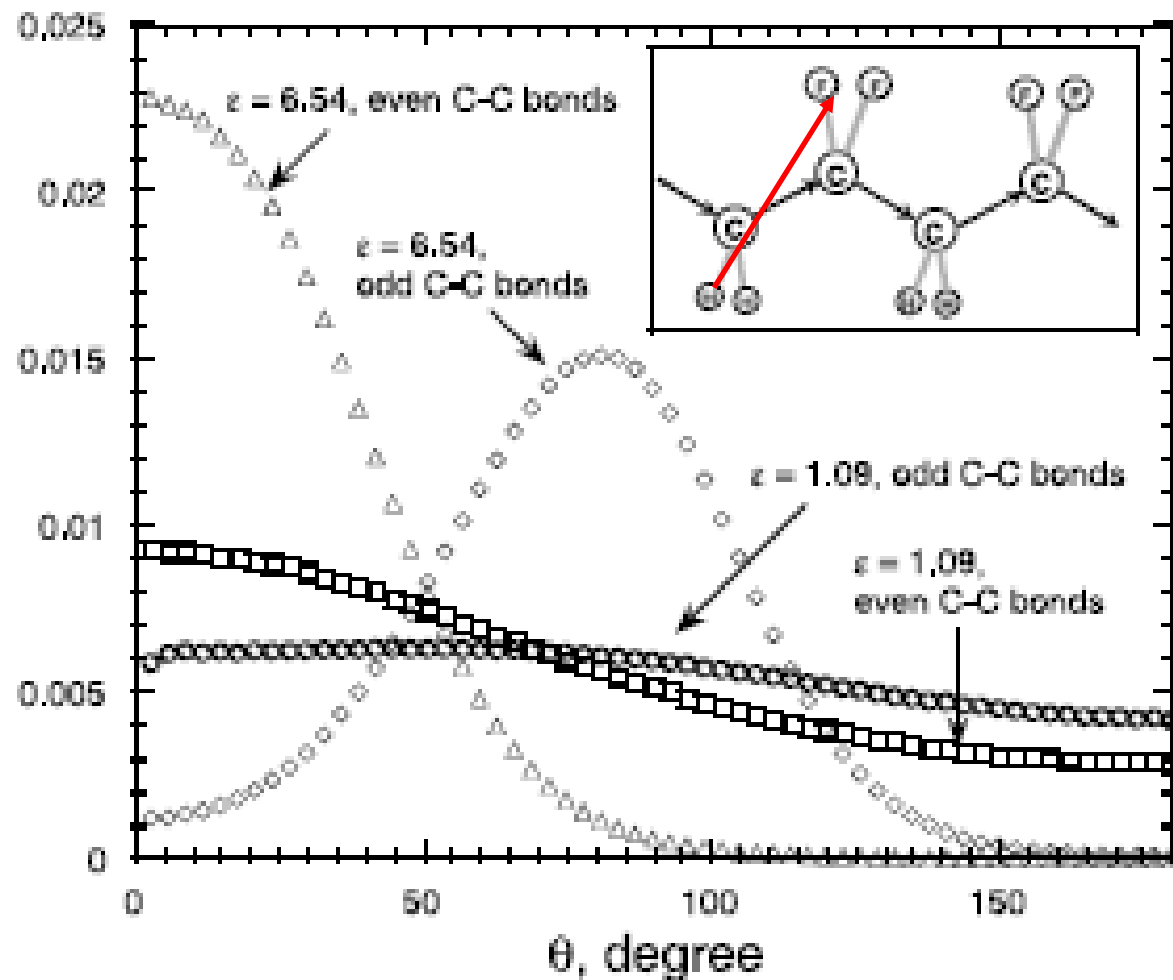
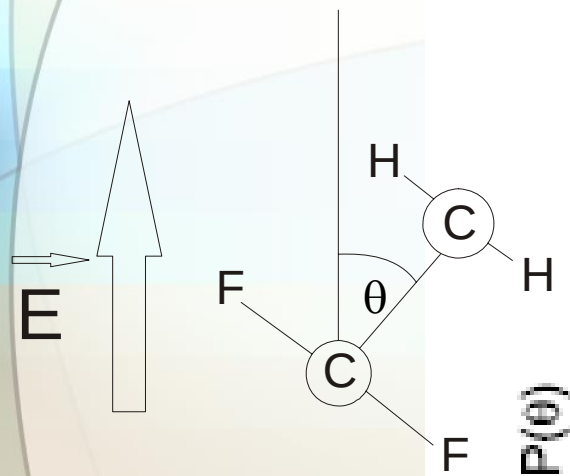
- Závislost bezrozměrné variance $\langle R^2 \rangle / b^2$ na

$$\varepsilon = \frac{E_o \cdot e \cdot b}{k \cdot T}$$

- **Model I:** popis rozdělení úhlů a jednotlivých vektorů pro sudé C-C vazby a liché C-C vazby. Hodnoty ε jsou v rozmezí hodnot 1,09 až 6,54.



- **Model II:** popis rozdělení úhlů a jednotlivých vektorů pro sudé C-C vazby a liché C-C vazby. Hodnoty ε jsou v rozmezí hodnot 1,09 až 6,54.



Závěr:

- Konformační chování polymerů ve vnějším elektrostatickém poli je klíčem k pochopení molekulárních jevů při elektrostatickém zvlákňování.
- Inspirace přírodou.

Poděkování: J.Ch. a D.L.

Nestandardní aplikace fyzikálních polí, GAČR 102/08/H081.