

Symulacje dynamiki molekularnej dla pojedynczego łańcucha polimerowego pomiędzy dwiema ścianami - jedną przyciągającą i jedną odpychającą

Piotr Kuterba,
Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej,
Uniwersytet Jagielloński, piotr.kuterba@uj.edu.pl

Zoryana Usatenko,
Instytut Fizyki, Politechnika Krakowska

12 lipca 2019

Streszczenie

Rozcienczone roztwory polimerowe w ograniczonej przestrzeni zachowują się w ciekawy sposób z przyczyn entropowych [1],[2],[3]. Ich właściwości zależą od warunków brzegowych ograniczających ścian, geometrii i struktury topologicznej łańcuchów polimerowych. Bardziej splątany polimer posiada mniejszą liczbę stopni swobody. W związku z tym interesujące jest sprawdzenie właściwości krytycznych łańcuchów polimerowych o różnej topologii w ograniczonej przestrzeni pomiędzy dwiema równoległymi ścianami z mieszanymi warunkami brzegowymi. Odpowiada to sytuacji kiedy jedna powierzchnia jest odpychająca względem polimeru a druga jest przyciągająca. Badania wykonaliśmy z wykorzystaniem metody dynamiki molekularnej dzięki której byliśmy w stanie otrzymać rozkład gęstości monomerów w poprzek szczeliny oraz zależność siły oddziaływania polimeru ze ściankami względem szerokości szczeliny. Indeks polimeryzacji wynosił $N = 360$ monomerów w łańcuchu. Badania przeprowadzono dla linowego oraz kołowych polimerów o różnej topologii ze stopniem splątania 3_1 oraz 9_1 . Uzyskane wyniki sugerują, że wraz ze zwiększaniem się stopnia splątania polimeru, mniejsza liczba monomerów jest w bezpośrednim kontakcie ze ścianką, co powoduje zmianę profilu gęstości monomerów w szczelinie. Oprócz tego przeprowadzono badania wskazującą na to, że siły rosną w miarę zwięzania się szczeliny co jest wyraźniejsze dla łańcuchów o strukturze z bardziej skomplikowaną topologią.

Literatura

- [1] Rudhardt D, Bechinger C and Leiderer P 1998 Phys.Rev.Lett. **81** 1330.
- [2] D. Romeis, Z. Usatenko, Phys. Rev. E, **80** 041802 (2009)
- [3] Z. Usatenko, et al. EPJ, **226** 4,pp.651-665.