

Název: Studium asociačního chování amfifilních kopolymerů v roztocích obsahujících nízkomolekulární látky pomocí počítačových simulací

Autor: Karel Šindelka

Department: Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova

Supervisor: Doc. Ing. Zuzana Limpouchová, Csc.

Abstrakt

Dizertační práce se zabývá studiem elektrostatické asociace v polymerních roztocích obsahujících blokové polyelektrolytové (PE) kopolymery spolu se surfaktanty, neutrálními homopolymery nebo jinými opačně nabitými polyelektrolyty. Bylo ukázáno, že tvorba asociátů závisí nejen na kooperativních elektrostatických interakcích mezi opačně nabitými PE řetězci, ale i na charakteru amfifilních interakcí polyelektrolytů a na kompatibilitě kopolymerních bloků. Polyelektrolyty s nekompatibilními bloky tvoří jasně definované struktury s hydrofobním jádrem a rozpustnou slupkou, zatímco v případě polyelektrolytů s kompatibilními bloky vznikají velké nejasně definované „crew-cut“ agregáty.

V nestechiometrických směsích PE kopolymerů s nekompatibilními bloky jsou agregované nanočástice menší než ve stechiometrických směsích a tyto nanočástice jsou navíc nabité. Nestabilita větších agregátů závisí na způsobu zavedení přebytku náboje: největší efekt je v případě, kdy se zvýší nábojová hustota na jednotlivých řetězcích, a nejmenší je v případě, kdy jsou nabitě řetězce prodlouženy. Ve všech případech se nevykompenzovaný náboj koncentruje na rozhraní jádra a slupky, kde je částečně odstíněn opačně nabitými protiionty. Velikost celkového náboje agregátu je přímo úměrná přebytku daného náboje v roztoku.

Také bylo ukázáno, že solubilizace neutrálních řetězků do agregátů vzniklých v nestechiometrických směsích diblokových polyelektrolytových kopolymerů s opačně nabitými homopolyelektrolyty může měnit strukturu agregované nanočástice. Krátké solubilizované řetězky mohou nahradit část homopolyelektrolytů a tím změnit znaménko celkového náboje agregátů.

Pomocí DPD simulací byly dále zreprodukovány výsledky experimentálních měření spontánní asociace poly(N-isopropylakrylamidu) (PNIPAm) modifikovaného karboxylovou a dodecyllovou koncovou skupinou a jeho koasociace s kationtovým surfaktantem (dodecylpyridinium chlorid) pro malá množství přidaného surfaktantu. Rozdílné výsledky simulací a experimentálních měření pro velká množství přidaného surfaktantu souvisí se specifickými interakcemi (redistribuce vodíkových vazeb mezi monomery PNIPAmu a vodou), které nejsou zahrnuty v DPD modelu.

Klíčová slova: polyelektrolyty, blokové kopolymery, elektrostatická asociace, počítačové simulace, disipativní částicová dynamika