UNIVERZITA KARLOVA

Přírodovědecká fakulta
Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Disertační práce

Teoretické studium větvených polyelektrolytů

by Varvara PROKACHEVA

Abstrakt

Dizertační práce je věnována teoretickému studiu větvených pH-responsivních polyelektrolytů včetně hvězdic, molekulárních kartáčů a také hydrogelů ve zředěných vodných solných roztocích. Bylo zkoumáno, jak vnější parametry, jako je iontová síla, pH a kvalita rozpouštědla, ovlivňují vlastnosti a vnitřní strukturu těchto polyelektrolytů. Studie byla provedena vývojem analytické teorie, jejíž výsledky byly ověřeny numerickou metodou Scheutjens–Fleer self-consistent field a simulacemi Monte Carlo a molekulové dynamiky.

Konkurence mezi elektrostatickým odpuzováním a solvofobními interakcemi krátkého dosahu vede ke složitým vzorům v rámci intramolekulární samoorganizace rozvětvených polyelektrolytů. To má za následek tvorbu doménových struktur, zejména struktury jádro-slupka a perlový náhrdelník ve hvězdicích a molekulárních kartáčích. Tyto domény jsou tvořeny téměř neutrálními kolabovanými řetězci a stabilizovány nataženými a ionizovanými řetězci.

Tato studie je relevantní jak z hlediska vytváření nových funkčních polymerních materiálů pro širokou škálu aplikací, tak z hlediska dalšího pokroku ve vědě o polymerech. Konkrétně je prezentováno potenciální využití separace fází v hydrofobních slabých polyelektrolytových hydrogelech pro odsolování vody.