

Název: Spontánní asociace (dissipative particle dynamics)

Autor: Karel Šindelka

Ústav: Faculty of science, Charles University in Prague

Školitel: Doc. Ing. Zuzana Limpouchová, CSc.

Konzultant: Doc. Ing. Martin Lísal, DSc.

## Abstrakt

V diplomové práci je studována spontánní asociace ekvimolární směsi kladně a záporně nabitých symetrických blokových kopolymerů s jedním polyelektrolytovým blokem (silný polykation nebo silný polyanion) a jedním dobře rozpustným blokem ve vodných roztocích pomocí zhrubného modelu a disipativní částicové dynamiky (DPD).

V první části diplomové práce jsou popsány základy DPD simulací a správnost implementace elektrostatických interakcí do DPD metody je ukázána na příkladu kondenzace protiiontů (Manningovy kondenzace).

Ve druhé stěžejní části je studován vliv rozpustnosti obou bloků, jejich nekompatibility a vzájemné souhry různých sil na elektrostatickou asociaci. Pro srovnání jsou uvedeny také simulace odpovídajících neutrálních systémů. DPD studie ukázala, že jak rozpustnost polyelektrolytového bloku tak nekompatibilita bloků hrají při elektrostatické asociaci důležitou roli. Přítomnost opačných nábojů na různých řetězcích přispívá k agregaci a vede k vyššímu agregačnímu číslu ve srovnání s odpovídajícím neutrálním systémem. V systémech s dobře rozpustným nabitým blokem vznikají pouze dimery, zatímco v systémech se špatně rozpustným polyelektrolytovým blokem vznikají agregáty s jádrem a slupkou pro nekompatibilní bloky a nanogelové částice pro kompatibilní bloky.

**Klíčová slova:** polyelektrolyty, blokové kopolymery, počítačové simulace