

Abstrakt

Dizertační práce se zabývá studiem konformačního chování větvených polymerů v prostorově omezených prostředích. Konformační chování polymerů v omezeném prostředí závisí nejenom na jejich složení a architektuře, ale také na sterickém omezení a na interakci polymerních segmentů s ohraničující stěnou. Lepší porozumění komplexní souhře entropických a entalpických efektů pomáhá vysvětlit chromatografickou separaci z mikroskopického hlediska. Protože velikost polymerního klubka závisí na jeho architektuře, samotná rozměrově vylučovací chromatografie (SEC) často neumožňuje separaci vzorku obsahujícího polymery různých architektur, dokonce ani v případě homopolymerů. Vzhledem k tomu že interakce polymerů se stěnami pórů závisí silně na jeho architektuře, moderní chromatografické metody často kombinují SEC s interakční chromatografií. Detailní znalost konformačního chování větvených polymerů nabízí možnost využití komplikujících dějů v nových speciálních chromatografických aplikacích.

Bylo ukázáno, že souhra entalpických a entropických vlivů v prostorově omezených prostředích je mnohem složitější než v samotném roztoku, protože dochází ke snížení entropie v důsledku prostorového omezení a ke změnám entropie a entalpie v důsledku interakce polymeru s povrchem. V důsledku rozdílné deformovatelnosti lineárních a H-polymerů lze najít podmínky nazývané “branching compensation adsorption strength”, BCAS, za kterých mají lineární a H-polymery stejný rozdělovací koeficient. Bylo prokázáno, že se jedná o obecný jev, který nezávisí na složení směsí. Tento poznatek je důležitý nejenom z teoretického ale i z praktického hlediska. Na jedné straně to znamená, že nevhodný výběr experimentálních podmínek, může zhoršit účinnost chromatografické separace. Na straně druhé, kombinace výsledků rozměrové vylučovací chromatografie s výsledky interakční chromatografie může poskytnout cenné informace o architektuře polymerů.

Klíčová slova: počítačové simulace, Monte Carlo, disipativní částicová dynamika, chromatografická separace, polymery ve tvaru písmene H, lineární polymery, směsi