

Abstrakt: Prostřednictvím molekulárních simulací studujeme disociační chování slabých polykyselin s přídavkem soli. Slabé polykyseliny jsou makromolekuly, které nesou slabě kyselé skupiny a proto se jejich ionizace mění s pH. Titrační křivka takové kyseliny se odchyluje od ideální – její ionizace je potlačena kvůli silnému odpuzování mezi nabitými skupinami na kontuře polykyseliny. Přítomnost soli v roztoku polykyseliny zvyšuje ionizaci vlivem účinků elektrostatického stínění a kondenzace protiiontů. Vliv valence na ionizaci slabých polykyselin soli nebyl doposud zkoumán, i když hraje důležitou roli v biologických procesech. V této práci studujeme roztoky slabých polykyselin s přídavkem solí různé valence kationtů (+1,+2,+3) při konstantním poměru náboje kationtů k počtu polymérních segmentů. Pozorujeme, že zvyšování valence kationtů soli podporuje ionizaci polyelektrolytů způsobem, který se liší od efektu zvýšení iontové síly. Vyšší valence protiiontů vede k nižší hodnotě kritického Manningova parametru a způsobuje silnou kondenzaci protiiontů, která vede k další ionizaci polyelektrolytů v důsledku korelací mezi kondenzovanými protiionty a nabitými skupinami polyelektrolytů.