

Název: Lineární semiflexibilní polyelektrolyty v roztocích
Řešitel: Petra Bačová
Ústav: Katedra fyzikální a makromolekulární chemie
Školitel: Doc. Ing. Zuzana Limpouchová, CSc.
E-mail školitele: zl@vivien.natur.cuni.cz
Konzultant: Mgr. Peter Košovan, PhD.

Abstrakt:

V předložené diplomové práci jsem se zabývala využitím MD simulací při studiu chování nabitých polymerů (polyelektrolytů) v roztocích. Velká část polyelektrolytových řetězců je semiflexibilní a narozdíl od neutrálních polymerů můžeme jejich ohebnost ovlivňovat kvalitou rozpouštědla, například změnou iontové síly. Flexibilitu řetězce můžeme popsat pomocí persistentní délky. Diplomová práce ukazuje, jak je možné vyjádřit persistentní délku z orientační korelační funkce, jejíž hodnota pro studovaný systém klesá dvojexponenciálně. To znamená, že ohebnost řetězce lze popsat dvěma příspěvky, přičemž v diplomové práci se zabývám zejména jedním z nich, který lze vyjádřit pomocí elektrostatické persistentní délky. Vliv přidané soli na konformaci řetězce je studován v rámci Debye-Hückelovy aproximace. Výsledky MD simulací jsou porovnány s OSF teorií a s variačními výpočty podle Manghiho a Netze. Předložená práce popisuje konformační chování polyelektrolytů v zasolených roztocích, je příspěvkem k formulování pojmu persistentní délky a jejího vztahu k tuhosti makromolekul v roztocích.

Klíčové slova: polyelektrolyty, perzistenční délka, simulace, zasolené roztoky