

Zastosowanie metody Monte Carlo Wanga–Landaua do modelowania własności termicznych i mechanicznych pojedynczych pierścieni polimerowych w roztworze

Franco Ferrari^(*)

Instytut Fizyki, Uniwersytet Szczeciński

Tematem niniejszego referatu są właściwości i sposób zachowania się w roztworach pojedynczych łańcuchów polimerowych w postaci węzłów. Polimery są modelowane na prostej sieci sześcienniej. Ich własności statystyczne są badane w oparciu o wykresy średnich wartości oczekiwanych kilku obserwabli, takich jak energia właściwa, właściwa pojemność cieplna oraz tzw. promień bezwładności. W przypadku gdy łańcuch jest rozciągnięty przy użyciu zewnętrznej siły skierowanej wzdłuż osi z, mierzona jest również wysokość punktu zaczepienia siły. Średnie są obliczone za pomocą metody Monte Carlo w wariacie algorytmu Wanga-Landaua. Algorytm został odpowiednio przyśpieszony oraz zrównoleglony tak, aby umożliwić próbkowanie wielkich liczb (rzędu kilkudziesięciu do kilkunastu miliardów) konformacji węzłów. Przedstawione wyniki dotyczą węzłów różnego typu, na przykład tzw. koniczyny (*trefoil knot*), ósemki (*figure-eight knot*) i wielu innych. Z wykonanej analizy wynika, iż łańcuchy polimerowe w postaci węzłów mają bogatą różnorodność zachowań, które mogą być wykorzystane do dostrojenia właściwości materiałów polimerowych. Na przykład, polimery takie puchną szybciej albo wolniej pod wpływem wzrastającej temperatury w zależności od rodzaju węzła oraz oddziaływań pomiędzy monomerami. W trakcie referatu pokazane będą również interesujące cechy rozciągniętych węzłów, które w niskich temperaturach relaksują się skokowo.

^(*) franco@feynman.fiz.univ.szczecin.pl