Αυτο-ομοιότητα (self-similarity) πολυμερών - Fractals

Ενελιξία -> σχετίζεται με διαμόρφωση αλυσίδας στο χώρο.

Η διαμόρφωση καθορίζεται από τα διανύσματα δεσμών (bond vectors) μεταξύ γειτονικών ατόμων.

Εκτός της ενελιξίας οι αλληλεπιδράσεις μονομερών μεταξύ τους και με το περιβάλλον παίζουν ρόλο στην ενελιξία.

<u>Fractal</u>

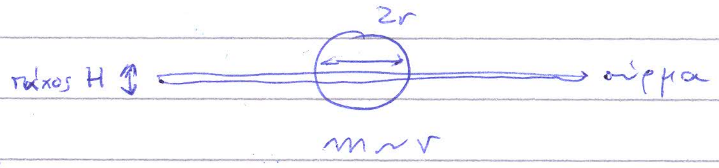
Θεωρούμε σφαίρα ακτίνας R, $V = \frac{4}{3}\pi R^3 \sim R^3 \sim$ μάζα M

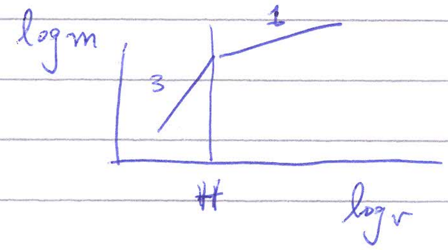
Διάσταση σφαίρας R^n, $n=3$

Άλλη σφαίρα ακτίνας $r<R \Rightarrow m \sim r^3$

Σε 2 διαστάσεις, κύκλος $m \sim r^2$

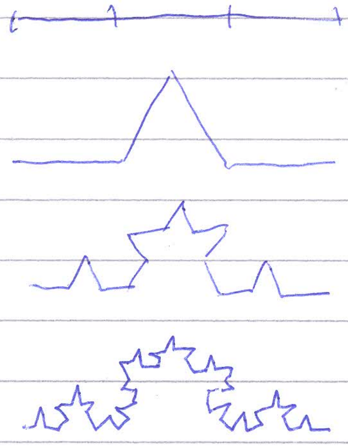
Σε 1 διάσταση

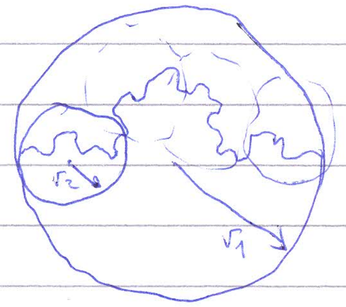




$\underline{m \sim r}$

Τριαδική Καμπύλη Koch





Παρατηρούμε: $r_1 = 3 r_2$

αλλά $m_1 = 4 m_2$

Γενικά: $m \sim r^D$

D = διάσταση fractal

Δύο τρόπω $m_1 \Longleftrightarrow r_2$

$$\left.\begin{aligned} m_1 &= A r_1^D = A (3 r_2)^D \\ m_1 &= 4 m_2 = 4 A\, r_2^D \\ A &= \text{σταθερά} \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (3 r_2)^D = 4\, r_2^D$$

$$\Rightarrow D = \frac{\log 4}{\log 3} \simeq 1.26$$

Πολυμερή: $N \sim \langle R^2 \rangle$ $\qquad D = 2$

οποιοδήποτε υποσύνολο: $g \sim \langle r^2 \rangle$

Πολυμερή: αυτο-ομοιότητα γιά $l < r < R$

$\uparrow$ μήκος δεσμού (cut off)

Τμήμα πολυμερούς με g μονομερή: $g \sim \left(\sqrt{\langle r^2 \rangle}\right)^D$

Αρχιτεκτονική έχει σημασία. Και αλληλεπιδράσεις. Συνήθως $D < 3$

c συγκέντρωση μάζας
ϕ κλάσμα όγκου

$$\phi = \frac{c}{\rho}$$

$$\rho = \frac{M_{mon}}{v_{mon} N_A}$$

↳ μοριακός όγκος πολυμερούς

Όγκος διαβροχής $V \simeq R^3$ R = μέγεθος αλυσίδας
$N \sim R^D$ $D < 3$

∴ Το μεγαλύτερο μέρος του όγκου διαβροχής καλύπτεται από διαλύτη

Κλάσμα όγκου επικάλυψης $\phi^* = \dfrac{N v_{mon}}{V}$

$$c^* = \frac{\rho N v_{mon}}{V}$$

Παράμετρος επικάλυψης $P = \dfrac{\phi V}{N v_{mon}} = \dfrac{\phi}{\phi^*}$

Μοριακά Βάρη

$M_N = M_{mon} N$

Αριθμητικό (ή μοριακό) κλάσμα n_N

Κλάσμα βάρους $w_N = \dfrac{n_N M_N}{\sum_N n_N M_N} = \dfrac{n_N N}{\sum_N n_N N}$