

III. FİZİKSEL KİMYA GÜNLERİ KONGRE BİLDİRİLER KİTABI

20. yıl
Balıkesir Üniversitesi
1992



<http://fizikselkimya.balikesir.edu.tr>
fizikselkimya2012@balikesir.edu.tr

12-15 Temmuz 2012, Burhaniye/BALIKESİR

Monte Carlo Metodu İle Tek Polimer Zincirinin θ Çözücü İçindeki Hareketi

B23

Ayşe Bulut¹ Taner Tanrısever²

¹Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Bölümü, ayseblt@gmail.com

²Balıkesir Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü, taner@balikesir.edu.tr

10-50 birimlik zincirler, üç farklı şekilde 100x100 matris içine yerleştirildikten sonra, hareketleri Monte Carlo Metodu ile simüle edilmiştir.

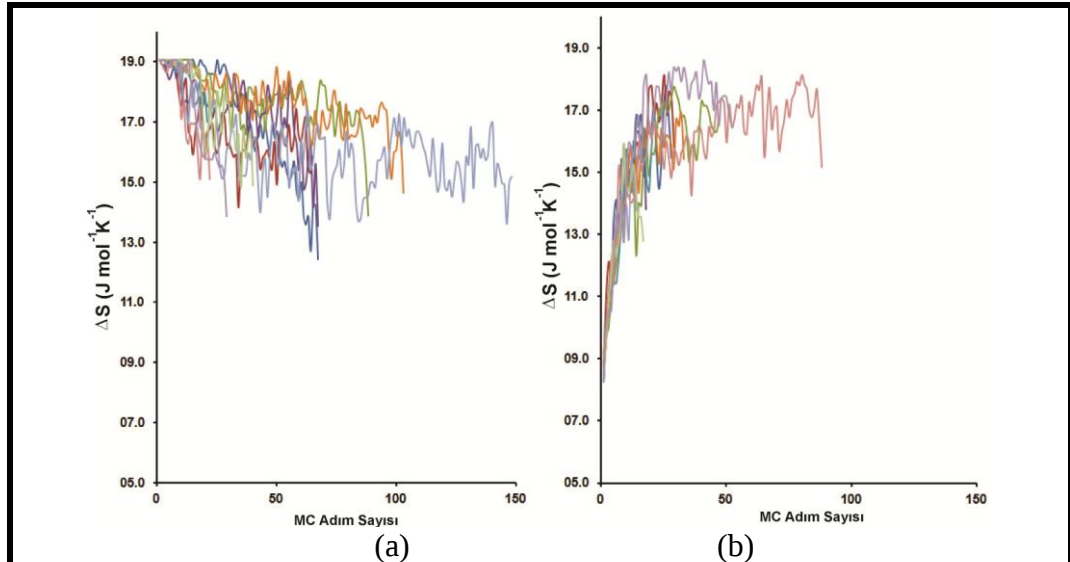
Simülasyonun ilerlemesi sırasında ortamın θ şartlarında olduğu, zincir ve çözücü türler arasında herhangi bir etkileşmenin bulunmadığı düşünülmüştür.

Her bir Monte Carlo Adımı sonrası entropi, her bir molekülün komşu dört molekül ile yer değiştirebileceği varsayılarak $S = k \ln W$ eşitliğine göre hesaplanmıştır. Ayrıca göreceli zamana karşı uçtan uca uzaklık (end to end distance) değişimi hesaplanmıştır.

Herbir Monte Carlo Adımı sonrası zincirin son durumu elde edilmiş ve her bir durum için zincirin simülasyondaki türlerin entropi değişimleri hesaplanmıştır.

Simülasyon ortamı FreeBSD 7.0 işletim sistemi yüklü 512 MB fiziksel hafıza, Intel Celeron 2.26 GHz sunucu olup, simülasyon dili olarak PHP 5.26 programlama dili kullanılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Monte Carlo, self-avoiding walk, SAW, end to end distance



Şekil 1: İki farklı şekilde yerleştirilmiş 50 birimlik 10 farklı zincirin , Monte Carlo adımlarının ilerlemesi ile entropi değişimi. (a) başlangıçta zincir maksimum entropili olacak şekilde yerleştirilmiştir. (b) başlangıçta zincir minimum entropili olacak şekilde yerleştirilmiştir.