



VI. Ulusal Polimer Bilim ve Teknolojisi Kongresi

**4-7 Eylül 2016
Ankara**



3D Huggins Matrisinde Tek Polimer Zinciri ve Yürüyüşleri

B25

Taner TANRISEVER¹ Ayşe MARTİN²

¹Balıkesir Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Çağış Yerleşkesi

²Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizikoimya Anabilim Dalı
taner@balikesir.edu.tr, aysebulut@yandex.com

Çeşitli birim uzunluklardaki polimer zincirleri 3 boyutlu Huggins kafes örgüsü içerisine doğrusal, yumak ve rastlantısal (freely jointed chain) konformasyonlarda yerleştirilmiştir. Yerleşmeden sonra zincirlerin bu örgü içerisindeki 3 boyutlu hareketi Monte Carlo Metodu ile simüle edilmiştir. Simülasyonun ilerlemesi sırasında simülasyon ortamının theta şartlarında olduğu düşünülmüştür. Her bir Monte Carlo Adımı sonrası zincirlerin aldığı konformasyonlar belirlenmiştir. Bu konformasyonlar göz önüne alınarak göreceli zamana karşı zincir büyüklüğünde meydana gelen değişim incelenmiştir. Her bir adımdan sonra uçtan uca uzunluk ve jirasyon çapları hesaplanmıştır. Ayrıca Freely Joined Chain modeline göre üretilen aynı uzunluktaki zincirlerin boyut dağılımları incelenmiştir.

Simülasyon ortamı FreeBSD 8.4-RELEASE işletim sistemi yüklü 1024 MB fiziksel hafıza, Intel Pentium 4 3.00 GHz sunucu olup, simülasyon dili olarak Web programcılığında da kullanılan PHP 5.5.8 programlama dili ve veritabanı olarak mysql ver 14.14 Distrib 5.6.15 kullanılmıştır. Simülasyon için geliştirilen algoritma bu dil ile yazılmıştır.

