

## 端基被平面壁吸附的高分子链的Monte Carlo研究

罗孟波; 陈英才; 黄建花; 许健民

浙江大学物理系, 杭州 310028; 台州师范专科学校物理系, 台州 317000; 浙江大学化学系, 杭州 310028

### 摘要:

运用Monte Carlo方法研究了端基被无限大平面壁吸附的线型无规飞行链的末端距矢量 $R$ 的分布 $P(R)$ 和链的形状, 计算了末端距矢量 $R$ 与 $z$ 轴(垂直于平板)的夹角 $\theta$ , 链的最大主轴 $L_3$ 与 $z$ 轴的夹角 $\alpha$ , 以及 $R$ 与 $L_3$ 的夹角 $\beta$ 的平均值 $\langle\theta\rangle$ 、 $\langle\alpha\rangle$ 、 $\langle\beta\rangle$ 和各自的分布. 得到如下结论: 1. 端基吸附的高分子链的均方末端距 $\approx(4/3)n$ , 末端距矢量的径向分布为非高斯型,  $P(R)dR=2A_4\exp(-A_2R^2)R^3dR$ , 其中 $n$ 为链长,  $A_2=3/(2n)$ . 表明链受到限制后, 较小的末端距 $R$ 的分布概率减小, 而较大的 $R$ 的分布概率增大, 导致链变得较为伸展. 2. 角 $\theta$ 的平均值 $\langle\theta\rangle\approx 45^\circ$ , 分布为 $P(\theta)d\theta = \sin 2\theta d\theta$ , 表明吸附高分子链的末端极少处于平面附近, 即平面对高分子链具有排斥作用. 但角 $\alpha$ 的平均值 $\langle\alpha\rangle\approx 55.5^\circ$ , 分布近似为 $P(\alpha)d\alpha = \sin\alpha d\alpha$ , 均与自由链的情况相近, 表面平面对最大主轴 $L_3$ 的方向的影响不大. 3. 端基吸附的高分子链的末端距矢量 $R$ 与最大主轴 $L_3$ 之间有较强的关联, 它们的夹角 $\beta$ 的平均值 $\langle\beta\rangle\approx 27^\circ$ , 其分布的峰值所对应的 $\beta$ 值约为 $10^\circ$ . 4. 吸附高分子链的形状更偏离球形, 形状因子 $S$ : 约等于1:2.73:12.5.

关键词: 末端距矢量 形状因子 分布函数 高分子链

收稿日期 2000-10-20 修回日期 2001-01-03 网络版发布日期 2001-05-15

通讯作者: 罗孟波 Email: mbluo@mail.hz.zj.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(649KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 末端距矢量

▶ 形状因子

▶ 分布函数

▶ 高分子链

本文作者相关文章

▶ 罗孟波

▶ 陈英才

▶ 黄建花

▶ 许健民