

Übung 5

Self Avoiding Walk

1. Erschaffen Sie mit einem geeigneten Programm eine große Anzahl an selbstvermeidenden Zufallspfaden (SAW) für mindestens 6 verschiedene Schrittzahlen N . Was beobachten Sie bei der Erschaffung sehr langer Pfade?
2. Berechnen Sie End-zu-End Abstände und Gyrationenradien der SAW und vergleichen Sie mit theoretischen Vorhersagen. Welchem Polymermodell entspricht der SAW? Welche fraktale Dimension haben Ihre Systeme?
3. Berechnen Sie die Streufunktion $S(q)$ um die in Aufgabe 2 getroffenen Aussagen mit einer zweiten Methode zu verifizieren. Vergleichen Sie die Ergebnisse für die Fraktale Dimension. Welche Fehlerquellen haben die verschiedenen Ansätze?

Adsorption von Polymerketten

1. Erstellen Sie Konformationen einer Einzelkette mit unterschiedlichen Längen N mit und ohne ausgeschlossenenem Volumen und geeigneten Randbedingungen für Simulationen mit absorbierenden Wänden.
2. Bestimmen Sie die Adsorptionsenergie für die Kettenlänge $N = 64$ für $\epsilon[0, 2]$ und erläutern Sie Ihre Beobachtungen. Vergleichen Sie (qualitativ) mit dem idealen Gas.
3. Simulieren Sie Ketten unterschiedlicher Länge in schwacher ($\epsilon < 1 k_B T$) und starker Adsorption und bestimmen Sie einerseits das Verhalten der Ausdehnung $R_g \sim N^x$ parallel und senkrecht zur Wand und andererseits die Größe der Adsorptionsblobs. Vergleichen Sie mit den theoretischen Vorhersagen.