먼저, Halloysite nanotube 의 가장 중요한 특성인 pH dependent 한 성질을 확인하기 위해 nanotube 의 titration curve 을 살펴보았다. 이어서 이 ph dependent 특성이 폴리머에 어떤 영향을 끼치는지를 확인하기 위해, 나노튜브와 폴리머가 같이 있는 시스템에서 나노튜브의 타이트레이션 커브 또한 확인하였다.

1. 먼저 pH dependent 성질이 구현되었는지 확인하기 위해, titration 을 알아 봄   
   - 실제로 pH 에 따라inner surf/outer surf frac charge 다르게 나타남   
   - 음/양/유무의 차이가 없음 -> electrolyte 의 영향을 받지 않음
2. 그렇다면 pH 에 따라 frac charge 가 변하고, 이게 어떻게 주변의 polyelectrolyte 에 영향을 주는지 살펴 봄.   
   - polyelectrolyte 의 conformation + loop tail train
3. Polyelectrolyte conformation with Rg Ree

* pH 에 따라 control 과 달라지는데, positive 같은 경우 pH 가 낮아지면 더 작아지고 (뭉치고) pH 가 커지면 Rg Ree도 더 빳빳해졌다
* 반대로 negative 는 pH 가 커지면 더 뭉치고 Rg Ree 가 작아졌는데, pH 가 낮은 경우는 positive 와 달리 control 과 큰 차이가 없었다.
* Rg 와 Ree 는 값은 달랐지만, 그 분포와 평균이 pH 에 따라 변하는 것이 비슷한 양상을 보였다.

>> fractional charge 가 pH에 따라 변하고, 이 양에 따라 surface group 의 counter ion 의 fractional charge 또한 변한다고 했을 때, counter ion charge 의 총 량의 변화로 polyelectrolyte의 conformation 변화와 screening effect 를 설명할 수 있다.

>> table + ionic strength 와 coulomb / wall … + 이온 총량 / 평균이 control 에서 얼마나 변했는지 + - 로 쓰기

>> Positive 의 경우, 이로 설명이 된다. 왜냐하면 control 에서 counter ion 총량에 따라 rg avg ree avg 가 높아지거나 낮아졌기 때문이다.

>> 하지만 이 관점으로는 negative polyelectrolyte 의 pH 2/3 와 control 의 차이를 설명할 수 없는데, 왜냐하면 pH2, 3 에서 (ci – 가 많은 상태에서 ) Rg 가 크게 변하지 않았기 때문이다.

>> 이는 counter ion 의 수와 fractional charge 가 가장 주요한 영향이라고 생각할 때, negative chain 을 screening 하는 ci 는 + charge 의 al ci 이며, 튜브의 루멘 쪽에 존재할 확률이 높기 때문에, contact characteristic 에서 보듯, 바깥쪽에 있는 negative 체인이 크게 영향을 못 받았을 수 있다.

반대로 positive chain 은 바깥쪽에 위치한 silica 의 ci 이기 때문에 ci가 체인에 접근하기 용이하다.

>> 만약, ci 가 conformation에 영향을 주는지 확실하게 하기 위해, tube가 없는 chain 에 counterion의 수를 늘리거나, 혹은 fractional charge 를 다르게 준 두가지 시스템을 비교한다면, 이 효과를 확인할 수 있을 것이다.

>> 하지만 위의 결과로 ci 가 conformation에 큰 영향을 주지 않는다고 생각한다면, tube 의 모양과 absorption 으로 인한 random chain 의 restriction (steric hind?) 를 고려해 볼 수 있다. 왜냐하면 counter ion effect가 아니라면, 다른 pH의 영향은 표면 그룹의 fractional charge 일 수 있기 떄문이다.

~~>> 특히 pH 2와 8 이 위의 결과에서 두개의 극단적인 조건이지만, 이온의 양은 (layer length 는) 똑같은데 반대의 양이 아니라, 100 과 500인 것을 생각하면, pH 2 에서의 변화는 pH 8에서의 변화보다 훨씬 작을 수 있다.~~

~~>> 다음과 같은 이유를 추측해 볼 수 있다. 첫 번째는 counter ion 과 monomer의 영향 뿐만 아니라, surface group, 즉 튜브 자체와 counter ion 의 영향 때문이다.~~

1. Polyelectrolyte conformation with LTT analysis

* Polyelectrolyte 자체의 conformation 말고, surface 와 이루는 conformation 도 알아보았을 때, surface 에 loop, tail, train 을 형성하는 것 또한 pH 에 따라 다르게 나타났다.
* Positive 는 4~8 에서, negative 는 23 에서만 llt를 형성하였다.
* 특히 positive 같은 경우는, pH 가 커질 수록 loop 를 이루는 segment 의 길이, segmnt 의 수가 많아졌다. Polyelectrolyte 의 monomer 수는 40개로 정해져있으니, 이를 보상하여 tail 의 길이는 상대적으로 짧아졌다.
* 한편 negative 같은 경우는 positive 와 달리 trend 를 비교할 만큼 많은 pH condition에서 llt 를 만들지 않았다. pH 2, 3 에서만 llt 를 형성하였다.

>> adsorbed segment 의 수는 증가하지만, 길이/loop or segment/loop 의 양은 증가하지 않은 ltt 의 결과로, 어떻게 chain 이 표면에 작용하는지 추측해볼 수 있다. >> Attractive interaction 이 증가하여 adsorption 이 더 잘 일어나더라도, chain 의 monomer 모두가 빈틈 없이 붙어있을 확률 보단, 띠엄띄엄 붙는 경향이 있다

>> 이는2D의 표면과 1D 의 체인을 모델링하였지만, 실제 coarse grained model 은 nanotube 의 surface 도, chain 의 선형 모델도 bead 로 표현하기 때문이다. 체인을 흡착할 때loop 나 train 의 길이를 늘리기 보단, 작은 loop 와 train 을 여러개로 나누는게 bead-bead 가 interaction 한다는 관점에서 안정적이기 때문이다.

>>이를 그림으로 나타낸다면 다음과 같다.

~~>>즉, chain 이 더 흡착된다면,~~

~~>> interaction 은 점과 점의 관계로 adsorption probability 가loop, train 의 수는 그대로지만, 표면에 붙은 monomer 의 수는 증가하였다. 즉, adsorption 확률이 증가하더라도, 선형의 chain 전체가 표면에 달라 붙는 것이 아니라 chain 의 부분 부분이 붙는 것으로 보일 수 있다. 이를 그림으로 나타내면 다음과 같다.~~

~~>>figure~~

~~각각의 monomer 가 표면에 붙는 것으로 해석될 수 있다. Adsorption 이 2차원의 곡면과 1차원의 chain보다는 이 이는monomer 와 surface group bead 의 interaction으로 adsorption 이 증가하느~~

3.

1. Contact probability

그림 에서 보는 바와 같이, 나노튜브 자체의 전하는 pH

~~

위의 회색 라인으로 이루어진 그래프는 다른 음전하를 띤 폴리머나 양전하를 띤 폴리머와 큰 차이를 보이지 않았다. 그림자 진 영역을 에러영역이라 할 떄, 이 부분이 겹쳐져 보이는 것을 그림 몇 에서 알 수 있다.

그림을 보면 양전하의 체인은

pH 에 따라 Rg/Ree distribution 이 달라지는 이유를 두 가지로 추측해 볼 수 있다. pH 에 따라서 달라지는 것은 튜브의 전하비인데 이것에 surface 는 첫 번째는 체인과 나노튜브 자체의 영향이고,

두 번째는

ㅇ