

TARTU ÜLIKOOL
Füüsika-keemiateaduskond
Eksperimentaalfüüsika ja tehnoloogia instituut

ENDEL SOOLO

SULFONEERITUD KÕRVALAHELATEGA
POLÜTETRAFLUOROETÜLEENI MUDELI KOOSTAMINE
MOLEKULAARDÜNAMIKA SIMULATSIOONIDE TARBEKS

Magistritöö

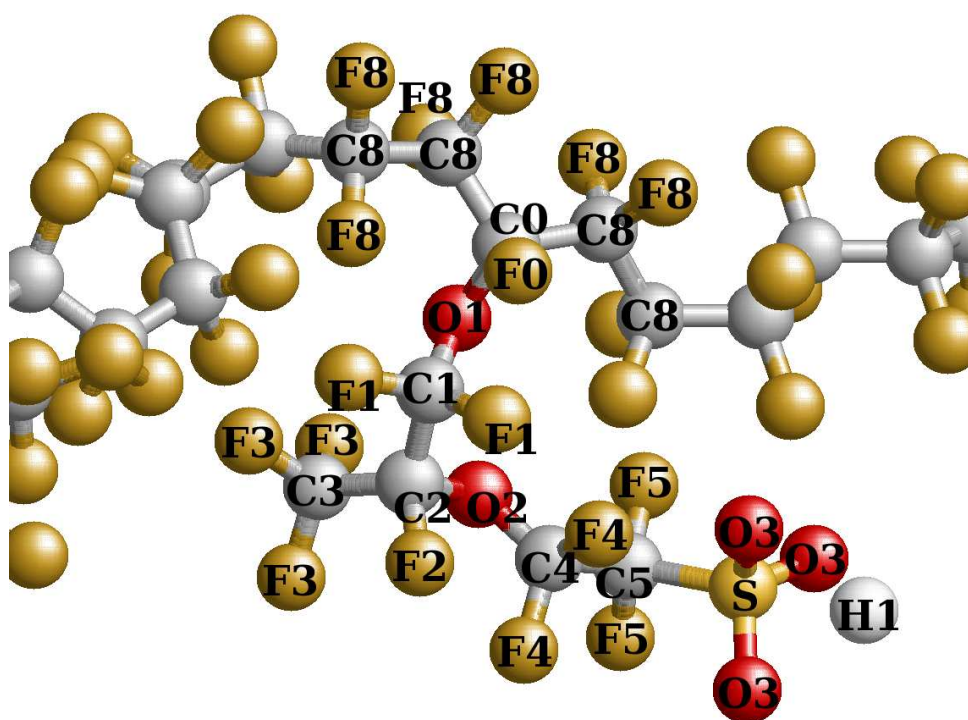
Juhendaja: polümeersete materjalide tehnoloogia professor ALVO AABLOO

Tartu 2007

Sisukord

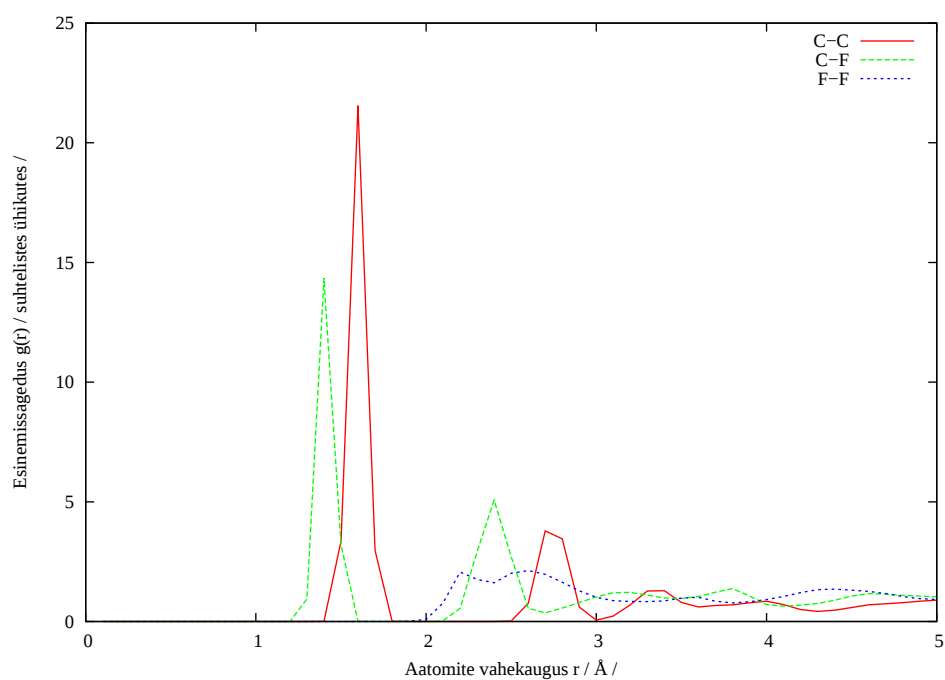
1	Sissejuhatus	3
2	Tulemuste analüüs	4

1 Sissejuhatus

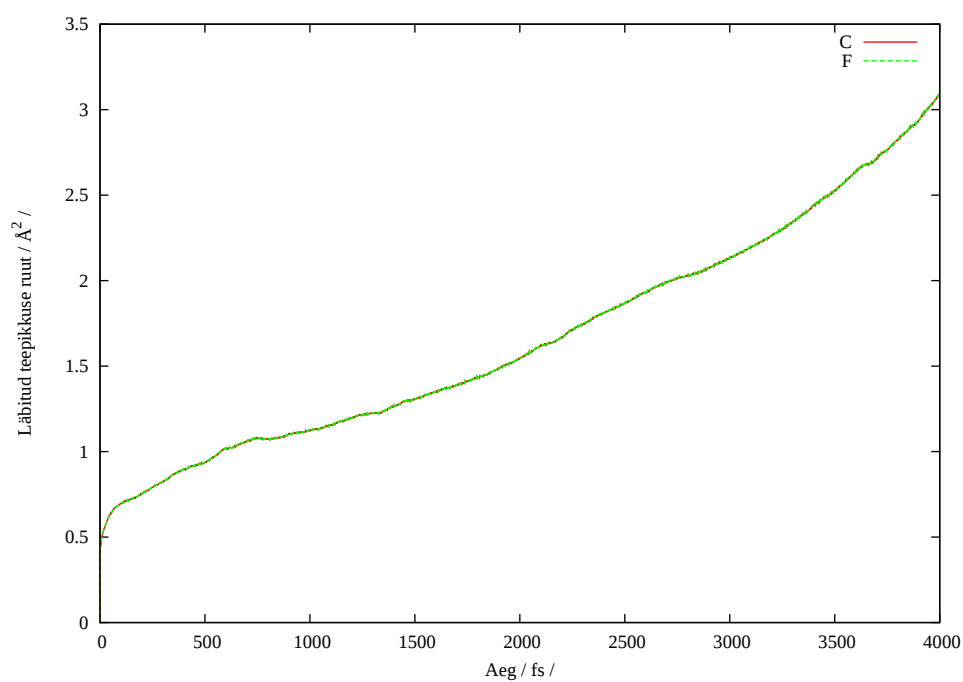


Joonis 1: Lõik nafioniõ ahelast. Aatomid C8 ja F8 kuuluvad peaaahelasse, ülejäänud kõrvalahelasse.

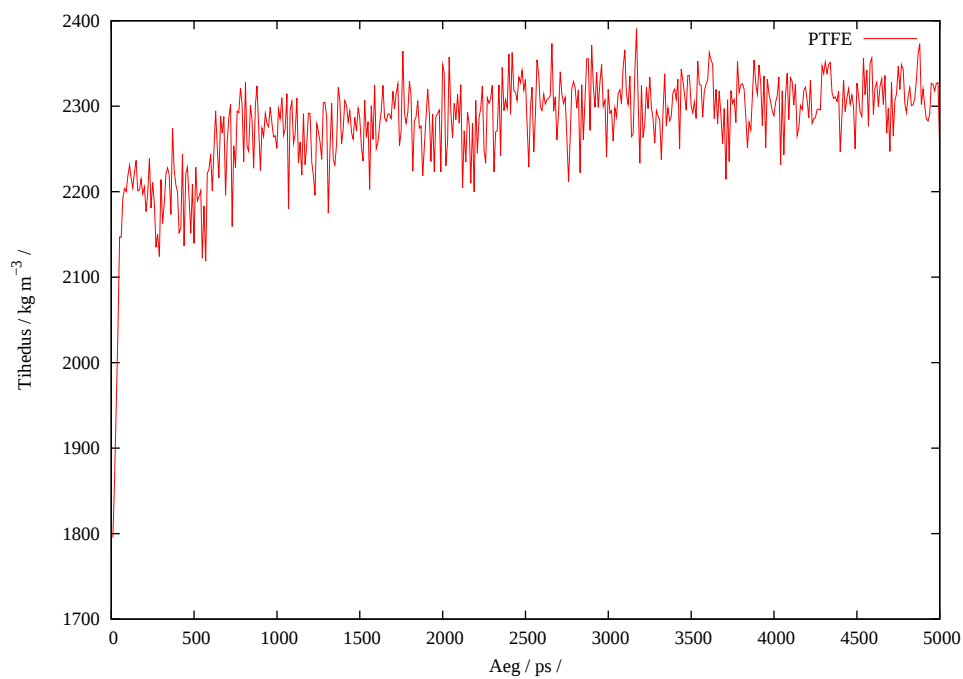
2 Tulemuste analüüs



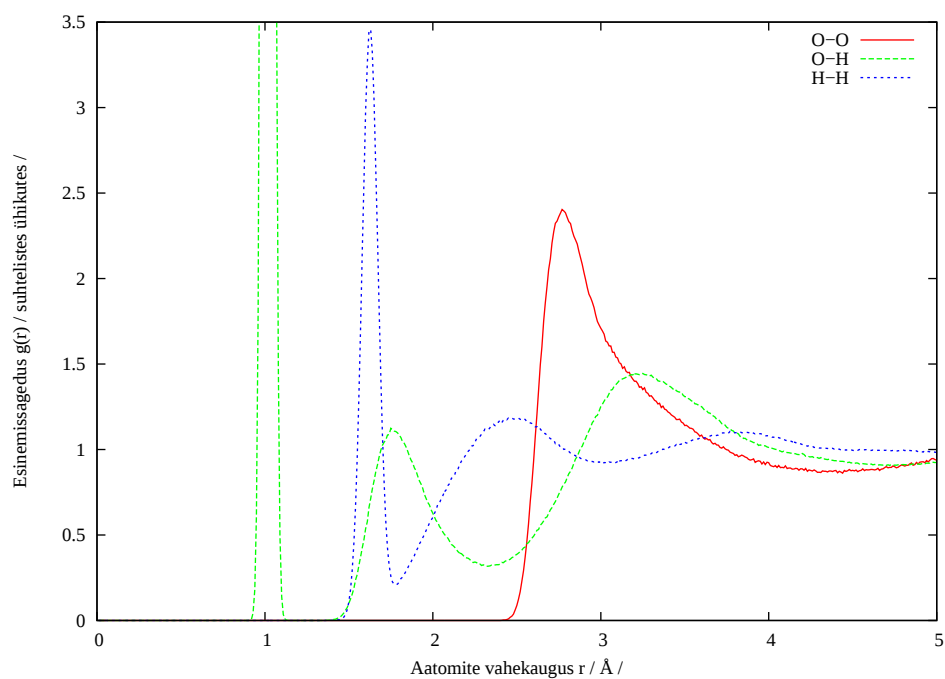
Joonis 2: Modelleeritud Tefloni radiaaljaotusfunktsioon



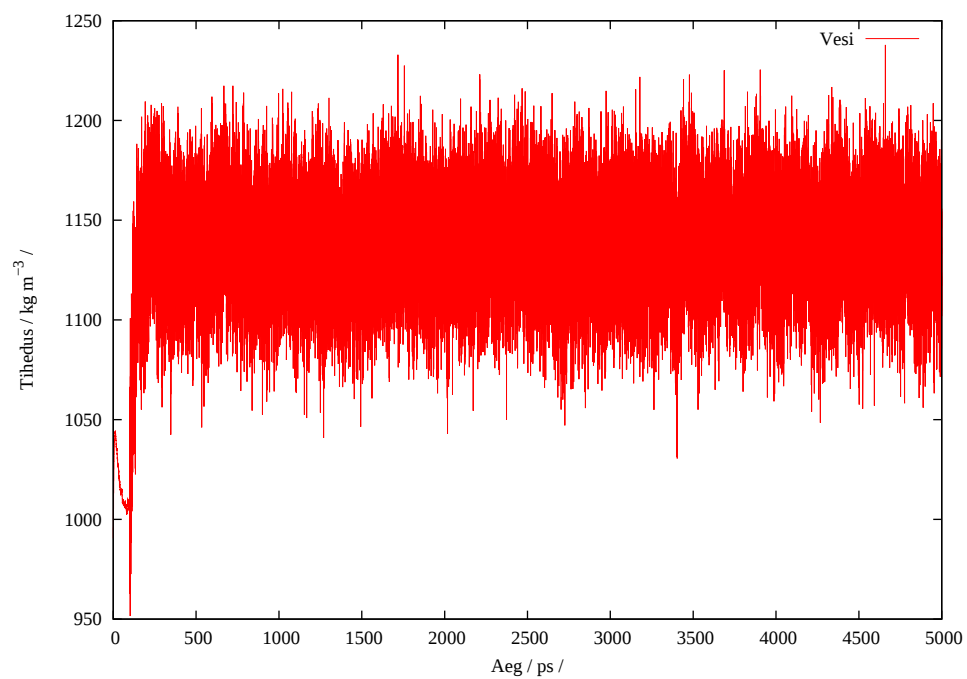
Joonis 3: Keskmise ruutnihke sõltuvus ajast



Joonis 4: Modelleeritud Tefloni tiheduse ajaline käik



Joonis 5: Modelleeritud vee radiaaljaotusfunktsioon



Joonis 6: Modelleeritud vee tiheduse ajaline käik