دانشگاه زنجان
دانشکده علوم - گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

عنوان:

مطالعه خواص آماری یک پلیمر باردار

نگارش:
یحیی خلیلی

استاد راهنما:
دکتر علی نجفی

دی ۱۳۹۰

تقدیم به
پدر و مادر عزیزم

خدایا...

ای سزاوار ثنای خویش، ای شکر کننده ی عطای خویش، ای شیرین نماینده ی بلای خویش، رهی به ذات خود از ثنای تو عاجز و به عقل خود از شناخت منّت تو عاجز و به توان خود از سزای تو عاجز. خدایا! گرفتار آن دردم که تو دوای آنی. در آرزوی آن سوزم که تو سرانجام آنی. من در تو چه دانم؟ تو دانی. تو آنی که خود گفتی و چنان که خود گفتی، آنی. می دانی و همه می دانند که شکنجه دیدن بخاطر تو، زندانی کشیدن بخاطر تو و رنج بردن به پای تو تنها لذت بزرگ زندگی من است، از شادی توست که من در دل می خندم، از امید رهایی توست که برق امید در چشمان خسته ام می درخشد و از خوشبختی توست که هوای پاک سعادت را در ریه هایم احساس می کنم. نمی توانم خوب حرف بزنم. نیروی شگفتی را که در زیر کلمات ساده و جمله های ضعیف و افتاده، پنهان کرده ام دریاب، دریاب.

تو، چگونه زیستن را به من بیاموز، چگونه مردن را خود خواهم آموخت.

به من توفیق تلاش در شکست، صبر در نومیدی، رفتن بی همراه، جهاد بی سلاح، کار بی پاداش، فداکاری در سکوت، دین بی دنیا، مذهب بی عوام، عظمت بی نام، خدمت بی نان، ایمان بی ریا، خوبی بی نمود، گستاخی بی خامی، قناعت بی غرور، عشق بی هوس، تنهایی در انبوه جمعیت، و دوست داشتن بی آنکه دوست بداند، روزی کن.

سپاس گزاری...

سپاس خداوندگار حکیم را که با لطف بی کران خود، آدمی را زیور عقل آراست.

در آغاز وظیفه خود می دانم از زحمات بی دریغ استاد راهنمای عزیزم، جناب آقای دکتر علی نجفی، صمیمانه تشکر و قدردانی کنم که قطعاً بدون راهنمایی های ارزنده ایشان، این مجموعه به انجام نمی رسید.

در پایان، بوسه می زنم بر دستان خداوندگاران مهر و مهربانی، پدر و مادر عزیزم و بعد از خدا، ستایش می کنم وجود مقدس شان را و تشکر می کنم از برادر و خواهران عزیزم به پاس عاطفه سرشار و گرمای امید بخش وجودشان، که در این سرد ترین روزگاران، بهترین پشتیبان من بودند. همچنین از دوستان و همکلاسی های عزیزم آقایان هادی علیزاده ثابت، فرهاد میلان، علی مرتضی پور، علی محمد ارجمندی، سینا کیایی، هادی پولادی، امید کورشی و سرکار خانم لطفی به خاطر کمک هایشان کمال تشکر و قدردانی را دارم.

یحیی خلیلی
دی ۱۳۹۰

چکیده

پلیمرها از جمله ملکول‌های بلندی هستند که می‌توانند نقش مهمی را در زندگی انسان بازی کنند و این موضوع ما را به این سمت سوق داد که خواص آماری یک پلیمر باردار را مورد بررسی قرار دهیم . برای این منظور در فصل اول مقدمه‌ای کوتاه در مورد پلیمر بیان کردیم و سپس به بررسی خواص آماری زنجیره‌های ایده‌آل پرداختیم. در همین راستا، طول پایداری پلیمر و طول قطعه آماری کوهن را مورد بررسی قرار دادیم. در فصل دوم به مطالعه‌ی خواص آماری زنجیره‌های محبوس پرداختیم. در فصل سوم حجم کنار گذاشته شده و مدل‌های مربوط به آن و برهمکنش‌های کوتاه برد و بلند برد را ارائه دادیم. و در همین راستا، نمای فلوری ν را برای زنجیره‌ی واقعی بدست آوردیم. در فصل آخر هم خواص آماری یک پلی الکترولیت را در تقریب حد میله‌ای بررسی می‌کنیم. ما نشان می‌دهیم به چه میزانی بارهای الکتریکی بر طول پایداری پلیمر تاثیر دارند.

واژه‌های کلیدی: *زنجیره‌ی ایده‌آل، زنجیره‌ی واقعی، طول کوهن، طول پایداری، بار الکتریکی، حجم کنار گذاشته شده.*

فهرست مطالب

فهرست مطالب یک

فهرست شکل‌ها سه

فهرست جدول‌ها شش

۱ خواص آماری پلیمرها ۱

۱.۱ مدل‌هایی برای زنجیره‌ی پلیمری خطی ۳

۲.۱ زنجیره‌ی واقعی ۷

۳.۱ زنجیره‌ی ایده‌آل ۹

۱.۳.۱ مدل پرواز تصادفی ۹

۴.۱ توزیع بردار انتها به انتها ۱۳

۵.۱ طول پایداری ۱۶

۶.۱ سختی خمشی پلیمر ۱۸

۷.۱ زنجیره‌ی گاوسی ۲۰

۸.۱ آرایش‌بندی زنجیره‌ای تحت یک میدان خارجی ۲۲

۹.۱ زنجیره‌ی پلیمری گاوسی در یک میدان خارجی ۲۴

۱۰.۱ زنجیره‌ی پلیمری گوسی پیوسته ۲۶

۱.۱۰.۱ هامیلتونی ادواردز ۲۶

۲.۱۰.۱ انتگرال گاوسی در $\mathbb{R}^\infty$ ۲۷

۳.۱۰.۱ انتگرال مسیر پلیمر ۲۸

۴.۱۰.۱ انتشارگرهای زنجیره‌ای ۲۹

۱۱.۱ میدان چگالی مونومر ۳۱

۱۲.۱ کوپلیمرها ۳۴

۱۳.۱ تابع پراکندگی ۳۶

۲ خواص آماری پلیمرهای محبوس **۴۱**
۱.۲ زنجیره ایده‌آل به دام افتاده در یک لوله ۴۱
۲.۲ جذب سطحی ضعیف یک زنجیره‌ی ایده‌آل ۴۲
۳.۲ زنجیره‌ی محصور شده در یک جعبه ۴۳
۴.۲ زنجیره‌ی محصور شده بین دو سطح ۴۶
۵.۲ زنجیره‌ی محصور شده در یک کره به شعاع D ۴۸

۳ اثر حجم کنار گذاشته شده **۵۲**
۱.۳ حجم کنار گذاشته شده از یک کره ۵۳
۲.۳ حجم کنار گذاشته شده در ملکول زنجیره‌ای ۵۴
۱.۲.۳ مدل زنجیره‌ی حجم کنار گذاشته شده ۵۶
۳.۳ روش‌های نظری ۵۹
۱.۳.۳ نظریه ساده ۵۹
۲.۳.۳ محاسبه اختلالی ۶۰
۳.۳.۳ مدل بسط یکنواخت ۶۱
۴.۳.۳ نظریه میدان متوسط ۶۳
۴.۳ محاسبه فلوری برای نمای ν ۶۳
۱.۴.۳ اصول ۶۳
۲.۴.۳ بالای چهار بعد زنجیره‌ها ایده‌آل هستند ۶۵
۵.۳ زنجیره‌های مقید ۶۶
۱.۵.۳ زنجیره‌ای تحت کشش ۶۶
۲.۵.۳ فشردن یک زنجیره ایده‌آل در یک لوله ۶۹

۴ پلی الکترولیت‌ها در نزدیکی حد میله‌ای **۷۲**
۱.۴ فرمول بندی مسئله ۷۳
۲.۴ حل مرتبه‌ی اول ۷۶

۵ نتیجه‌گیری **۸۰**

پیوست **۸۱**

مراجع **۸۲**

فهرست شکل‌ها

۱.۱ مونومرهایی که یک پلیمر را تشکیل می‌دهند [۴]. ۲

۲.۱ ساختار زنجیره ی پلیمری: (الف) پلیمر اتصال عرضی، (ب) زنجیره‌ی شاخه ای، (ج) زنجیره‌ی خطی [۲]. ۲

۳.۱ پلیمر وینلی [۲]. ۳

۴.۱ هموپلیمر و کوپلیمرهای بلوکی [۲]. ۳

۵.۱ ساده سازی آرایش‌بندی از یک مدل مربوط به اتم (الف) به زنجیره‌ی اتم‌های اصلی (ب) و سپس به پیوندها در زنجیره اصلی (ج) و سرانجام به مدل انعطاف پذیر ریسمانی (د) [۲]. ۴

۶.۱ آرایش‌بندی یک حلقه تصادفی که به طول کامل خودش L، کشیده شده است [۲]. . . . ۴

۷.۱ مدل های مختلف برای پلیمر های زنجیره ای خطی در فضای پیوسته: (الف) مدل مروارید- گردنبد، (ب) مدل مهره-فنر، (ج) مدل مهره-چوب [۲]. ۵

۸.۱ (الف) زنجیره ی خطی بر روی شبکه مثلثی و (ب) زنجیره‌ی خطی بر روی شبکه مربعی [۲]. ۶

۹.۱ زنجیره‌ی خطی بر روی یک شبکه مکعبی [۲]. ۷

۱۰.۱ شبکه الماسی [۲]. ۸

۱۱.۱ (الف) آرایش‌بندی یک زنجیره‌ی واقعی و (ب) آرایش‌بندی یک زنجیره‌ی ایده‌آل [۲]. . . ۸

۱۲.۱ زنجیره‌ی بند بند آزادانه [۳]. ۱۰

۱۳.۱ (الف) میانگین $\mathbf{r}_n$ در جهت $\mathbf{r}_{n-1}$، $\mathbf{r}_{n-1}\cos\theta$ را می‌دهد. (ب) زنجیره‌ی چرخان آزادانه [۳]. ۱۱

۱۴.۱ زنجیره‌ای که از $\tilde{N}$ ملکول ریز تشکیل شده است [۳]. ۱۵

۱۵.۱ حافظه جهتی بین بردارهای $\mathbf{b}_1$ و $\mathbf{b}_2$ [۸]. ۱۷

۱۶.۱ دو عکس لحظه‌ای از یک میله استوانه‌ای که توسط افت و خیز گرمایی محیط خم شده‌اند. هر چه طول ایستایی کمتر شود، میله انعطاف پذیری بیشتر و متوسط دو انتهای میله کمتر می‌شود [۷]. ۱۷

۱۷.۱ نمایش طول کوهن [۸]. ۲۰

۱۸.۱ زنجیره‌ی گوسی که از $N+1$ دانه تشکیل شده است [۲]. ۲۲

۱۹.۱ زنجیره‌ای که در $\mathbf{R}'$ شروع می‌شود در n گام از میان $\mathbf{R}''$ عبور می‌کند و با N گام در $\mathbf{R}$ به پایان می‌رسد [۳]. ۲۳

۲۰.۱ یک هموپلیمر به عنوان زنجیره‌ی گوسی پیوسته [۱۱]. ۲۶

۲۱.۱ کوپلیمر دو بلوکی: یک کربنیک اسید، همچنین به عنوان اسید چرب شناخته شده است و ممکن است زنجیره گاوسی پیوسته را معرفی کند. انتهای اسید کربنیک گروه $COOH$ (مونومر نمونه B) فعل و انفعالات متفاوتی با مولکول‌های آب حلال از بقیه زنجیره دارند (نمونه مونومر A) [۱۲]. ۳۴

۲۲.۱ مرکز جرم $\mathbf{R}_G$ و شعاع چرخش R_g در مدل مهره-چوب [۲]. ۳۸

۲۳.۱ فاصله مربعی متوسط بین دو مونومر n و m دو برابر R_g^2 است [۲]. ۳۹

۱.۲ زنجیره‌ای که در یک لوله استوانه‌ای به قطر $D \ll R$ محدود شده است [۵]. ۴۱

۲.۲ جذب سطحی از یک زنجیره ایده‌آل را نشان می‌دهد [۵]. ۴۲

۳.۲ یک پلیمر که در جعبه محصور شده است، الف) $\sqrt{N}\ b \ll L_x, L_y, L_Z$ و (ب) $\sqrt{N}\, b \gg L_x, L_y, L_Z$ [۱۵]. ۴۴

۴.۲ پلیمری که در کره محصور شده است، (الف) $\sqrt{N}\, b \gg D$ و (ب) $\sqrt{N}\, b \ll D$ . . ۵۰

۱.۳ حجم کنار گذاشته شده در سوسپانسیون کره‌ها. مرکز کره B توسط کره A از ناحیه کروی (خط چین) کنار گذاشته شده است [۲]. ۵۳

۲.۳ حجم اشغال شده در یک ملکول زنجیره‌ای. دو مهره سفید نمی‌توانند همدیگر را همپوشانی کنند [۲]. ۵۵

۳.۳ برهمکنش کوتاه برد و برهمکنش بلند برد در یک زنجیره‌ی پلیمری [۲]. ۵۶

۴.۳ طرحی از یک پتانسیل. پتانسیل می‌تواند به یک پتانسیل هسته‌ای $u_{hard}(r)$ و یک پتانسیل جاذبه $u_{attr}(r)$ تجزیه شود [۳]. ۵۸

۵.۳ زنجیره‌ای که از هر دو انتها کشیده شده است [۵]. ۶۷

۶.۳ زنجیره‌ای که به یک سری از حباب‌ها، هر یک با اندازه ξ_p تفکیک شده است [۵]. . . . ۶۸

۷.۳ نمودار $\frac{R}{R_f}$ بر حسب $x = \frac{fR_f}{T}$ [۵]. ۶۹

۸.۳ زنجیره‌ای که به صورت رشته‌ای از حباب‌ها به قطر D رفتار می‌کند [۵]. ۷۱

۱.۴ پلیون در نزدیکی حد میله‌ای ۷۴

فهرست جدول‌ها

۱.۱ مدل‌های مهره-چوب [۲]. ۵

۲.۱ عدد کوئوردیناسیون [۲]. ۷

فصل ۱

خواص آماری پلیمرها

در این فصل ابتدا مقدمه‌ی مختصری درباره پلیمر بیان کرده و سپس به بررسی زنجیره‌ی ایده‌آل و زنجیره‌ی واقعی می‌پردازیم، در این‌جا مدل‌هایی را برای زنجیره‌ی ایده‌آل در نظر گرفته و میانگین مربعی طول انتها به انتهای آن و تابع توزیع احتمال آن را بدست می‌آوریم. در مرحله‌ی بعد زنجیره‌ی گاوسی و زنجیره‌ی گاوسی تحت یک میدان خارجی را بررسی کرده و در نهایت تابع پراکندگی را مطرح می‌کنیم.

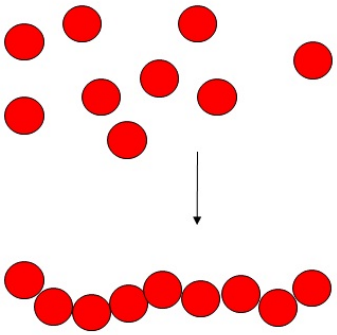
مقدمه

پلیمر[۱] واژه‌ای یونانی می‌باشد که از دو جز "پلی" به معنای زیاد و "مر" به معنای قسمت، تشکیل شده است. یک مولکول پلیمری از واحدهای تکراری به نام مونومر[۲] تشکیل شده است (شکل ۱.۱) [۱].

هر "مر" به طور طبیعی بیشتر از 5 و کمتر از 500 اتم در آرایش خود دارد. کلمه پلیمر زمانی به کار برده می‌شود که بیشتر از 50 "مر" به هم چسبیده شده باشند. زنجیره‌های بلند و انعطاف پذیر در طبیعت فراوان هستند که از جمله می‌توان به پلی اتیلن ($-(CH_2)_N-$) و پلی اکسی اتیلن ($-(CH_2-CH_2-O)_N-$) اشاره کرد [۱]. بیشتر پلاستیک‌هایی که خورده ریزهای اطراف ما را تشکیل می‌دهند از پلیمر ساخته شده‌اند. از لحاظ تاریخی پلیمرها بیشتر برای ساختن پلاستیک‌های جامدی که زنجیرهایشان واقعا جا به جا نمی‌شدند، مورد استفاد قرار می‌گرفت. اما امروزه مایعات پلیمری در جاهایی که افت و خیزهای گرمایی و برهمکنش‌ها

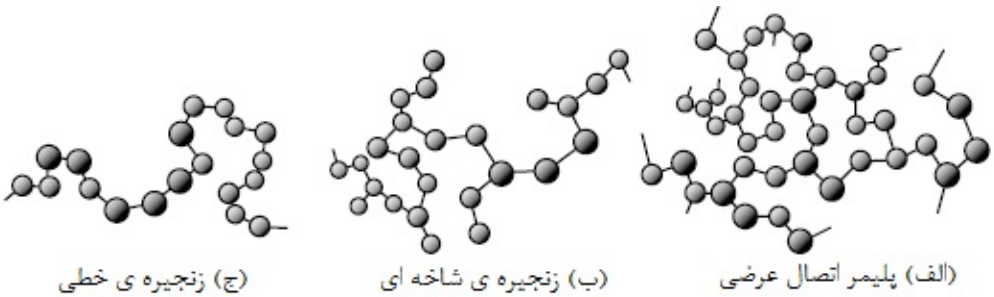
[۱] polymer

[۲] monomer



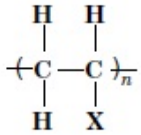
شکل ۱.۱: مونومرهایی که یک پلیمر را تشکیل می‌دهند [۴].

نقش مهمی دارند، کاربردهای فراوانی پیدا کرده‌اند. پلیمرها به خاطر چند ظرفیتی بودن اتم‌های مانند کربن، اکسیژن، نیتروژن، سولفار که می‌توانند ساختاری به هم پیوسته و بلند را شکل دهند، در طبیعت به فراوانی یافت می‌شوند. شکل ۲.۱ سه ساختار از یک ملکول پلیمری را نشان می دهد: (الف) پلیمر اتصال عرضی، (ب) زنجیره شاخه دار، (ج) زنجیره ی خطی. در این جا یک دانه نشان دهنده یک مونومر است.



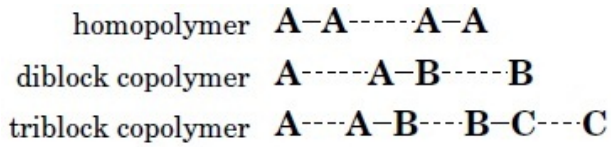
شکل ۲.۱: ساختار زنجیره ی پلیمری: (الف) پلیمر اتصال عرضی، (ب) زنجیره‌ی شاخه ای، (ج) زنجیره‌ی خطی [۲].

پلیمر وینیلی یک پلیمر خطی معمولی است (شکل ۳.۱). زنجیره‌ی شاخه‌ای دارای شاخه‌های کوتاه و بلند است. پلیمرهای اتصال عرضی از یک سیستم یکپارچه تشکیل شده‌اند. در حقیقت، تنها یک ابر مولکول در یک ظرف می‌تواند وجود داشته باشد. در زنجیره‌ی شاخه‌ای انشعاب منجر به ابر مولکول نمی‌شود. پلیمر اتصال عرضی فقط می‌تواند در یک حلال متورم شود ولی نمی‌تواند حل شود. برخی از ملکول‌های پلیمری از بیش از یک نوع مونومر تشکیل شده‌اند [۲]. یک کوپلیمر $A-B$ از دو مونومر A و B تشکیل شده است. موقعی که توالی و ترتیب مونومر تصادفی است کوپلیمر را کوپلیمر تصادفی می‌نامند. دسته‌های مختلفی از کوپلیمرهای خطی وجود دارند (شکل ۴.۱). در یک کوپلیمر دو بلوکی $A-B$ سراسر زنجیره از یک بلوک A



شکل ۳.۱: پلیمر وینلی [۲].

و یک بلوک B و یک مفصل بین آنها تشکیل شده است. در کوپلیمر سه بلوکی زنجیره دارای سه بلوک A, B و C است. پلیمری که از یک نوع مونومر تشکیل شده باشد را هموپلیمر می‌نامند، به عنوان یک مثال مناسب برای هموپلیمرها می‌توان به پلی اتیلن اشاره کرد [۲].

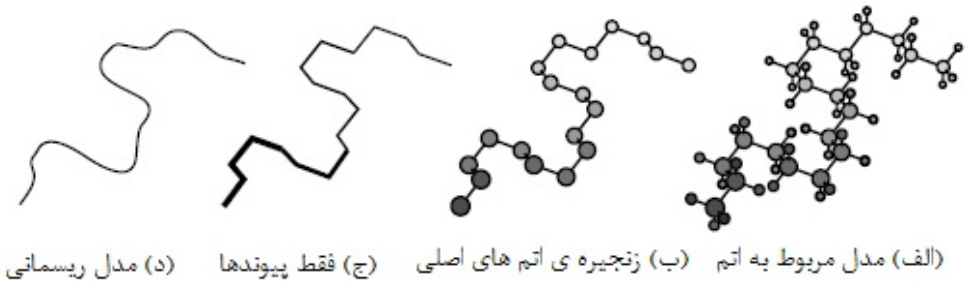


شکل ۴.۱: هموپلیمر و کوپلیمرهای بلوکی [۲].

۱.۱ مدل‌هایی برای زنجیره‌ی پلیمری خطی

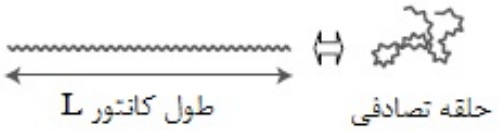
الف) مدل‌های پیوسته: یک زنجیره‌ی پلیمری در محلول شکل خود را دائما تغییر می دهد. یک شکل آنی از یک زنجیره‌ی پلیمری در محلول (شکل ۵.۱ الف) را آرایش‌بندی می‌نامند. برای نشان دادن آرایش زنجیره‌ی کلی، ما همه اتم‌ها به جز آنهایی که بر روی ستون فقرات هستند را پاک می‌کنیم (شکل ۵.۱ ب). سپس اتم‌ها را برمی‌داریم و زنجیره را به وسیله پیوندهای متصل شده، نشان می‌دهیم (شکل ۵.۱ ج). در پلی اتیلن خطی، برای نمونه، زنجیره فقط به وسیله اتصال پیوندهای کربن-کربن نشان داده شده است. بعلاوه می‌توان آرایش‌بندی را به یک خط مارپیچی تبدیل کرد (شکل ۵.۱ د) [۲]. در این مدل، زنجیره‌ی پلیمری یک شیء هندسی از یک ریسمان نازک انعطاف پذیر است.

حال می‌توان دو انتهای زنجیره‌ی خطی اسکلتی را برای گسترش کامل آن کشید (شکل ۶.۱). در یک پلیمر وینیلی، آرایش‌بندی زنجیره تمام ترنس است. فاصله بین دو سر، طول کانتور نامیده می‌شود. طول کانتور (L) با وزن مولکولی پلیمر متناسب است. در محلول این آرایش‌بندی کاملا کشیده شده، نامحتمل است. زنجیره



شکل ۵.۱: ساده سازی آرایش‌بندی از یک مدل مربوط به اتم (الف) به زنجیره‌ی اتم‌های اصلی (ب) و سپس به پیوندها در زنجیره اصلی (ج) و سرانجام به مدل انعطاف پذیر ریسمانی (د) [۲].

تقریبا مچاله می‌شود و آرایش بندی حلقه تصادفی را می‌گیرد [۲].



شکل ۶.۱: آرایش‌بندی یک حلقه تصادفی که به طول کامل خودش L، کشیده شده است [۲].

غیر از مدل زنجیره‌ی اسکلتی، چندین مدل دانه درشت نیز برای پیش بینی خواص فیزیکی وابسته به طول زنجیره و غلظت پلیمر مورد استفاده قرار می‌گیرند که از آن جمله عبارتند از: (الف) مدل مروارید-گردنبد[۱]، (ب) مدل مهره-فنر[۲]، و (ج) مدل مهره-چوب[۳] (شکل ۷.۱). در مدل مهره-چوب زنجیره از مهره‌ها و چوب‌هایی که مهره‌های مجاور را به هم متصل می‌کند، تشکیل شده است. در این مدل تغییرات زیادی امکان پذیر است: الف) قطر مهره و ضخامت چوب هر مقداری می‌تواند به خود بگیرد، ب) می‌توانیم زاویه بین چوب‌های مجاور را محدود کنیم یا اجازه دهیم آزادانه تغییر کند، ج) می‌توانیم زاویه دوسطحی یک چوب را نسبت به چوب بعدی محدود کنیم [۲]. جدول ۱.۱ دو نمونه تغییرات در مدل را مقایسه می‌کند: زنجیره بند بند آزادانه[۴] و زنجیره چرخشی آزادانه[۵]. هنگامی که زاویه پیوندی به زاویه چهار وجهی یک اتم کربن در

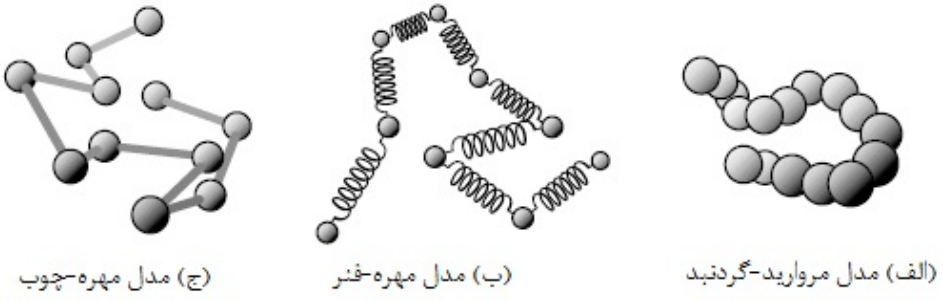
[۱] pearl-necklace model

[۲] bead-spring model

[۳] bead-stick model

[۴] freely jointed chain

[۵] freely rotating chain



شکل ۷.۱: مدل های مختلف برای پلیمر های زنجیره ای خطی در فضای پیوسته: (الف) مدل مروارید-گردنبد، (ب) مدل مهره-فنر، (ج) مدل مهره-چوب [۲].

اوربیتال‌های sp^3 ثابت شده است و زاویه دو سطحی به یکی از سه زاویه مطابق با ترنس، گوچ مثبت[۱] و گوچ منفی[۲] ثابت شده است، مدل ما از استواری پلیمر وینلی خطی واقعی پیروی می‌کند که معروف به مدل حالت ایزومتریک چرخشی است $(RIMS)$. یک مدل کمی پیچیده‌تر اجازه می‌دهد طول چوب و زاویه پیوندی مطابق پتانسیل‌های هارمونیک و به دنبال آن تابع پتانسیل خودش با کمینه محلی در سه زاویه، متغیر باشد. در مدل مهره و چوب، ما همچنین می‌توانیم هر مهره را به عنوان مرکز واحد مونومر (متشکل از چندین اتم یا بیشتر) و چوب‌ها را به عنوان اتصال بین مهره‌ها در نظر بگیریم. یک جفت مهره-چوب را قطعه می‌نامند. قطعه کوچک‌ترین واحد زنجیره است. هنگامی که قطر مهره صفر است، قطعه فقط یک چوب است [۲].

مدل	طول پیوند	زاویه پیوند	زاویه دو سطحی
زنجیره ی بند بند آزادانه	ثابت	آزاد	آزاد
زنجیره ی چرخشی آزادانه	ثابت	ثابت	آزاد

جدول ۱.۱: مدل‌های مهره-چوب [۲].

در مدل مهره-فنر تمام زنجیره به وسیله تعدادی از مهره‌هایی که با فنرهایی به هم متصل شده‌اند، نشان داده می‌شود. طول تعادلی هر فنر صفر است. مدل مهره-فنر به طور مناسبی حرکت قسمت‌های مختلف زنجیره را توصیف می‌کند. در این مدل، یک قطعه شامل یک فنر و یک مهره در انتهای آن است. در مدل مروارید-گردنبند مهره ها (مرواریدها) همیشه در تماس با دو مهره مجاور هستند. این مدل در اصل یک مدل

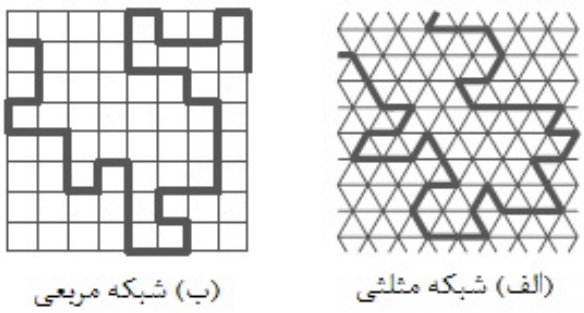
[۱] $gauche^+$

[۲] $gauche^-$

مهره-چوب با طول چوبی مساوی با قطر مهره است. قطر مهره همیشه مثبت است. مانند مدل مهره-چوب می‌توانیم زاویه پیوندی و زاویه دو سطحی را محدود کنیم.

ب) مدل‌های گسسته: مدل‌های توصیف شده در قبل در فضای پیوسته بودند. برای مثال در مدل مهره-چوب، مراکز مهره‌ها در هر جایی در فضای سه بعدی می‌توانند قرار گیرند، مشروط بر اینکه ترکیب، شرایط مورد نیاز مدل را برآورده کند. ما می‌توانیم زنجیره‌ی خطی را به خوبی در فضای گسسته بسازیم.

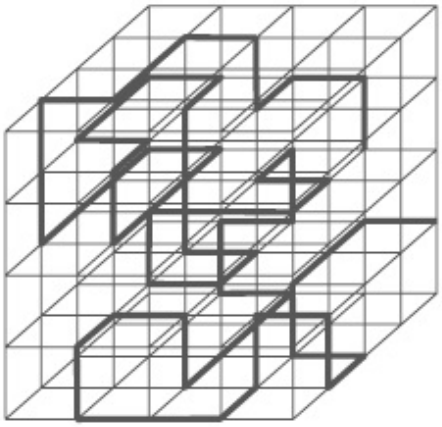
فضای گسسته یک شبکه نامیده می‌شود. در مدل شبکه‌ای، زنجیره‌ی پلیمری متشکل از مونومرها بر روی گریدها و پیوندهای اتصال دهنده آن‌ها قرار می‌گیرد. نقطه گریدی سایت نامیده می‌شود؛ شکل ۸.۱ یک زنجیره‌ی پلیمری خطی را بر روی یک شبکه‌ی مثلثی سه بعدی (الف) و یک شبکه ی مربعی دو بعدی (ب) نشان می‌دهد.



شکل ۸.۱: (الف) زنجیره ی خطی بر روی شبکه مثلثی و (ب) زنجیره‌ی خطی بر روی شبکه مربعی [۲].

قطعات از یک پیوند و یک نقطه بر روی سایت تشکیل شده‌اند، یک شبکه مکعبی در سه بعد، بارها مورد استفاده قرار گرفته است در صورتی که برای شبکه الماسی این اتفاق کمتر رخ داده است. شکل ۹.۱ یک زنجیره را بر روی شبکه مکعبی نشان می‌دهد. شبکه (چهار وجهی) الماسی از شبکه مکعبی و مرکز حجمی مکعب‌ها تشکیل شده است (شکل ۱۰.۱). زنجیره در شبکه الماسی همانند مدل مهره-چوب با یک زاویه پیوندی ثابت شده در زاویه چهار وجهی و یک زاویه دوجهی در یکی از سه زاویه ۱۲۰ درجه می‌باشد. فضاهای شبکه‌ای مشابه دیگری نیز وجود دارد.

مختصه شبکه ای Z به تعداد همسایه‌های اول نقاط شبکه برمی‌گردد (عدد کوئوردیناسیون). جدول ۲.۱ Z را برای چهار مدل گسسته می‌دهد [۲].



شکل ۹.۱: زنجیره‌ی خطی بر روی یک شبکه مکعبی [۲].

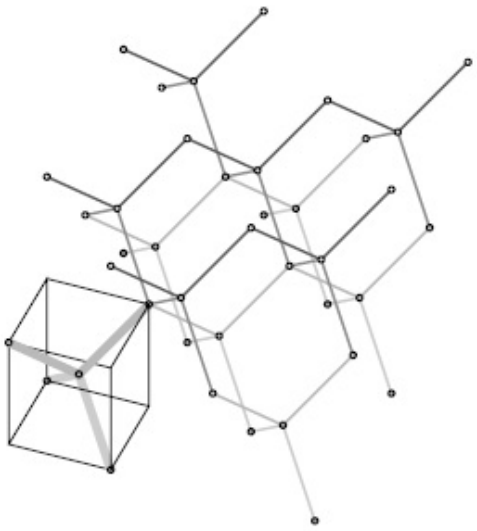
ابعاد	هندسه	Z
2	مربعی	4
2	مثلثی	6
3	مکعبی	6
3	الماسی	4

جدول ۲.۱: عدد کوئوردیناسیون [۲].

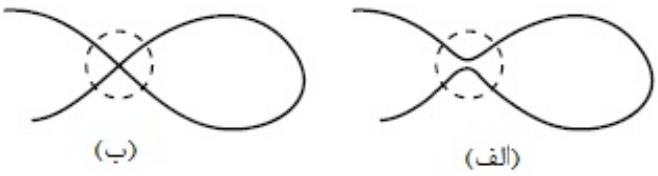
۲.۱ زنجیره‌ی واقعی

در هر زنجیره‌ی پلیمری، دو مونومر نمی‌توانند فضای یکسانی را اشغال کنند. حتی بخشی از یک مونومر نمی‌تواند با بخشی از مونومر دیگر همپوشانی کند. این اثر را اثر حجم کنار گذاشته شده می‌نامند و نقشی که در محلول‌های پلیمری ایفا می‌کند به مراتب مهم‌تر از نقشی است که در محلول‌های با مولکول‌های کوچک بازی می‌کند. ما اغلب زنجیره را به صورت ایده‌آل در می‌آوریم و مونومرها می‌توانند همپوشانی کنند. در مدل شبکه‌ای، دو یا چند مونومر از این زنجیره ایده‌آل می‌توانند سایت یکسان را اشغال کنند. برای تمییز یک زنجیره‌ی منظم با حجم کنار گذاشته از زنجیره ایده آل، ما زنجیره‌ی منظم با حجم کنار گذاشته را زنجیره‌ی واقعی یا زنجیره‌ی حجم اشغال شده می‌نامیم. شکل ۱۱.۱ تفاوت بین زنجیره‌ی واقعی (سمت راست) و زنجیره ی ایده‌آل (سمت چپ) را برای مدل ریسمانی در دو بعد نشان می‌دهد. آرایش‌بندی زنجیره‌ای تقریبا یکسان است به جز برای قسمت کوچکی که در آن، دو قسمت از زنجیره به هم نزدیک می‌شوند همان گونه که در شکل توسط دایره‌های نقطه چین نشان داده شده است. تقاطع در زنجیره ایده‌آل و نه در زنجیره‌ی واقعی،

مجاز است. در واقعیت زنجیره ایده‌آل وجود خارجی ندارد اما ما از مدل زنجیره ایده‌آل به طور گسترده‌ای استفاده می‌کنیم، چرا که این مدل این اجازه را به ما می‌دهد که مسائل متنوعی از محلول‌های پلیمری را با روش‌های ریاضی حل کنیم. ما می‌توانیم اثر حجم کنار گذاشته شده را به عنوان یک تفاوت کوچک با زنجیره‌ی ایده‌آل مورد بررسی قرار دهیم. از آن مهم‌تر این است که زنجیره‌ی واقعی در برخی محلول‌ها مانند زنجیره‌ی ایده‌آل رفتار می‌کند. برخی از این محلول‌ها عبارتند از شیشه‌ها، مذاب‌ها و محلول‌های غلیظ. مورد دیگری که می‌توان از مدل زنجیره‌ی ایده‌آل به جای زنجیره‌ی واقعی استفاده کرد، یک محلول رقیق در یک حلال مخصوص به نام حلال تتا است [۲].



شکل ۱۰.۱: شبکه الماسی [۲].



شکل ۱۱.۱: (الف) آرایش‌بندی یک زنجیره‌ی واقعی و (ب) آرایش‌بندی یک زنجیره‌ی ایده‌آل [۲].