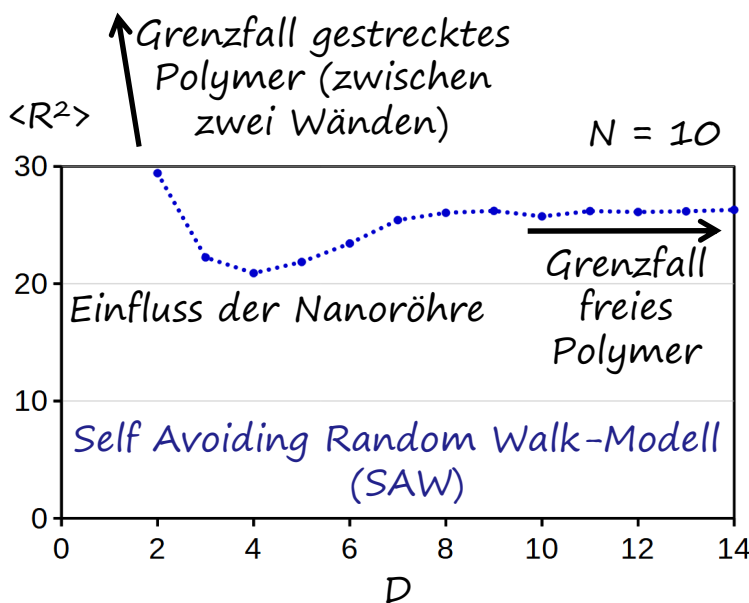
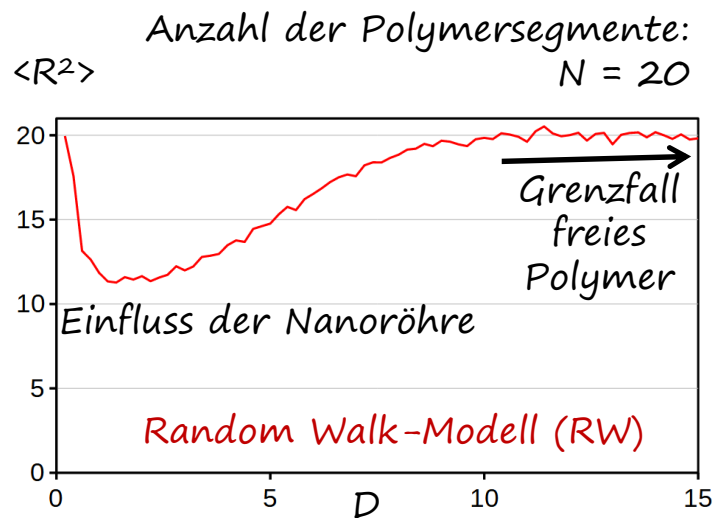


Wie immer, es kommt darauf an!

Modelliert man ein flexibles Polymermolekül mit dem **Random Walk-Modell** (kein Eigenvolumen), dann ist das Polymermolekül in der Nanoröhre kompakter. Der Graph rechts zeigt den **mittleren quadratischen End-End-Abstand**  $\langle R^2 \rangle$  in Abhängigkeit des Radius  $D$  der Röhre. Durch die Begrenzung des Raums durch die Röhre wird der für die Ausdehnung des Moleküls zur Verfügung stehende Raum verkleinert.



Modelliert man ein flexibles Polymermolekül mit dem **Self Avoiding Random Walk-Modell**, welches das Eigenvolumen der Polymersegmente berücksichtigt, dann ist das Polymermolekül für sehr kleine Röhren ausgedehnter. (Grenzfall gestrecktes Polymer)

Er gibt aber auch einen Bereich des Röhrenradius, bei dem das Polymermolekül auch unter Berücksichtigung des Eigenvolumens kompakter ist, wie die Abbildung links um  $D=4$  zeigt.