



**INNOWACYJNA
GOSPODARKA**
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

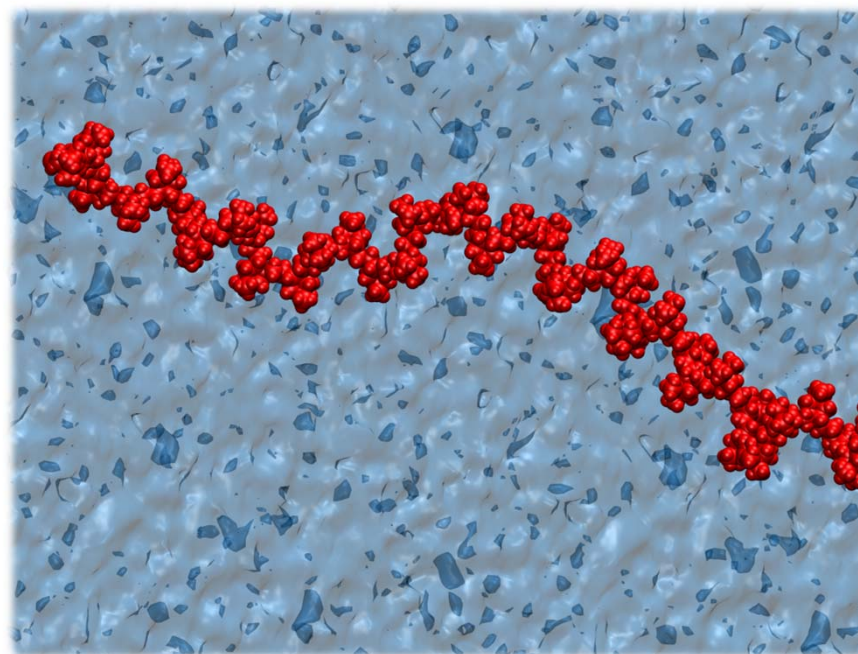


IKiFP
im. J. Habera
PAN

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO



Konformacja polielektrolitów w roztworach

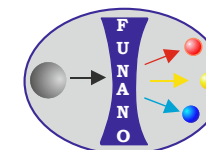


P. Batys, K. Jamroży, A. Michna, Z. Adamczyk

Seminarium sprawozdawcze FUNANO

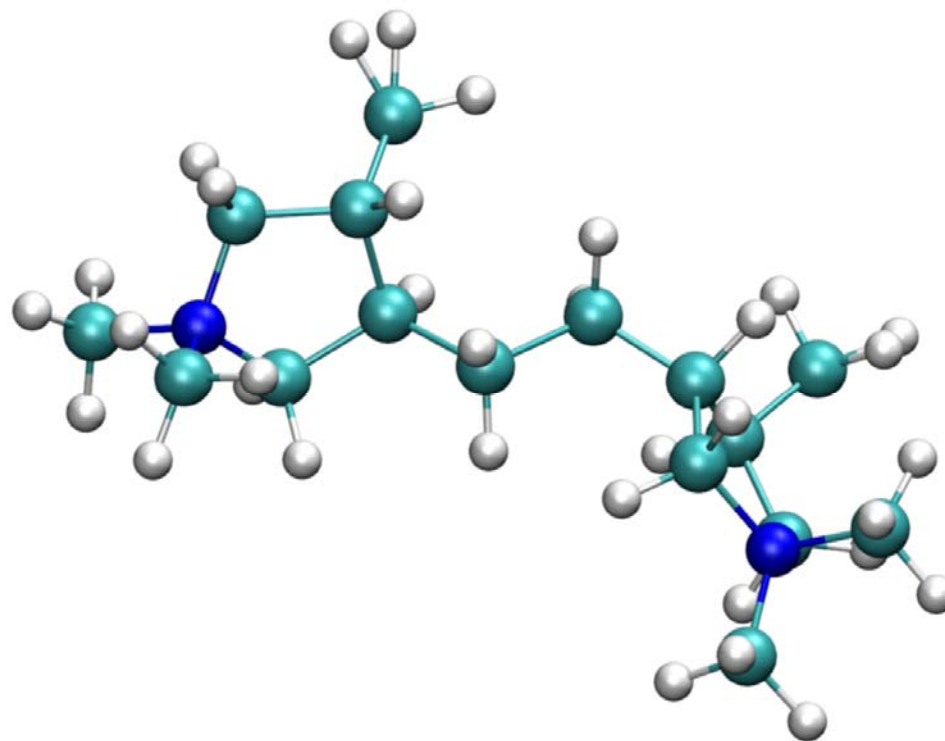
Kraków, 21.10.2014 r.

Projekt nr POIG.01.01.02-12-028/09 "Funkcjonalne nano i mikrocząstki - synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach (FUNANO)"



Metoda dynamiki molekularnej (MD) - wprowadzenie

- jest to metoda obliczeniowa używana do śledzenia położenia i prędkości oddziałujących ze sobą atomów

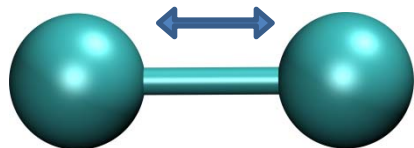


Pole siłowe

$$\vec{F}_i = -\nabla V_{\vec{r}_i}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$$

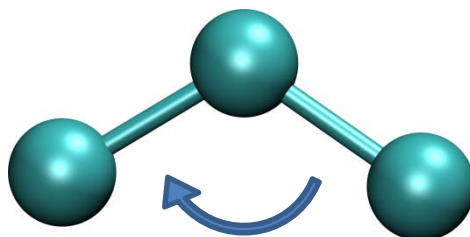
Wiązanie

$$V = \sum_i K_{b,i} (b_i - b_{0,i})^2$$



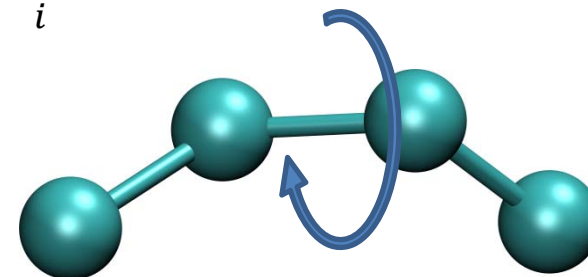
Kąty

$$+ \sum_i K_{\theta,i} (\theta_i - \theta_{0,i})^2$$



Kąty torsyjne

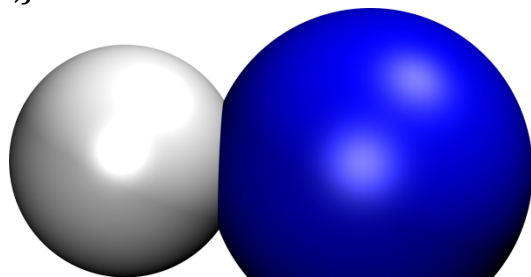
$$+ \sum_i K_{\varphi,i} \{1 - \cos[n_i(\varphi_i - \varphi_{0,i})]\}$$



Energia Van der Waalsa

(12-6 Lennard-Jones)

$$+ \sum_{\text{pary } i,j} \left[\varepsilon_{ij} \left(\frac{r_{0,ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2\varepsilon_{ij} \left(\frac{r_{0,ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$



Energia elektrostatyczna

$$+ \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{\text{pary } ij} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$



Skala czasowa

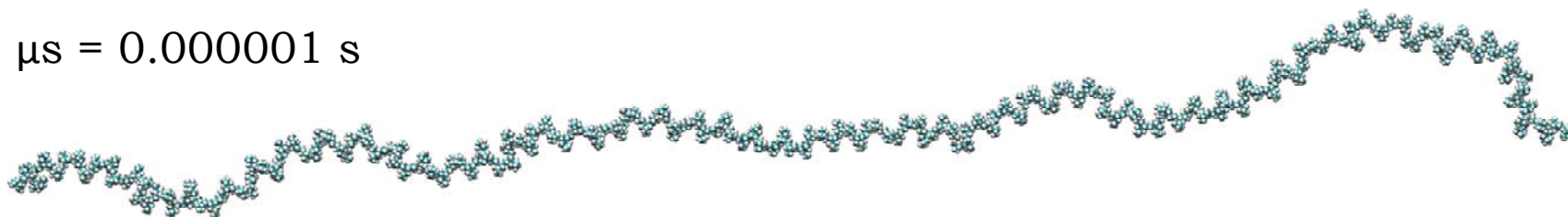
Maksymalny krok czasowy jest ograniczony przez najszybszy ruch w układzie – drgania wiązania H – C

= 0.5 femto sekundy (0.0000000000000005 s)

Sztywne wiązania → ~2 fs

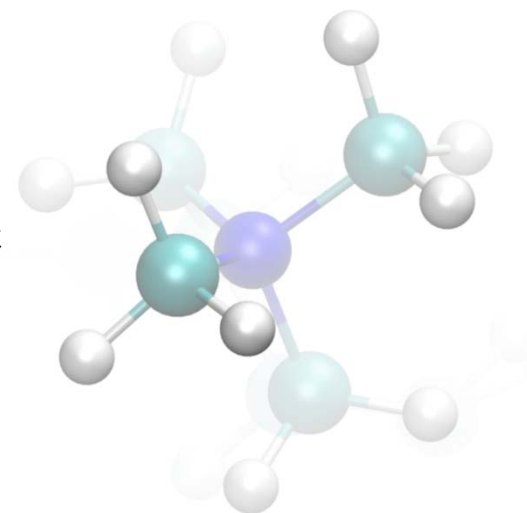
Skala czasowa interesujących nas procesów to mikro sekundy

1 μ s = 0.000001 s

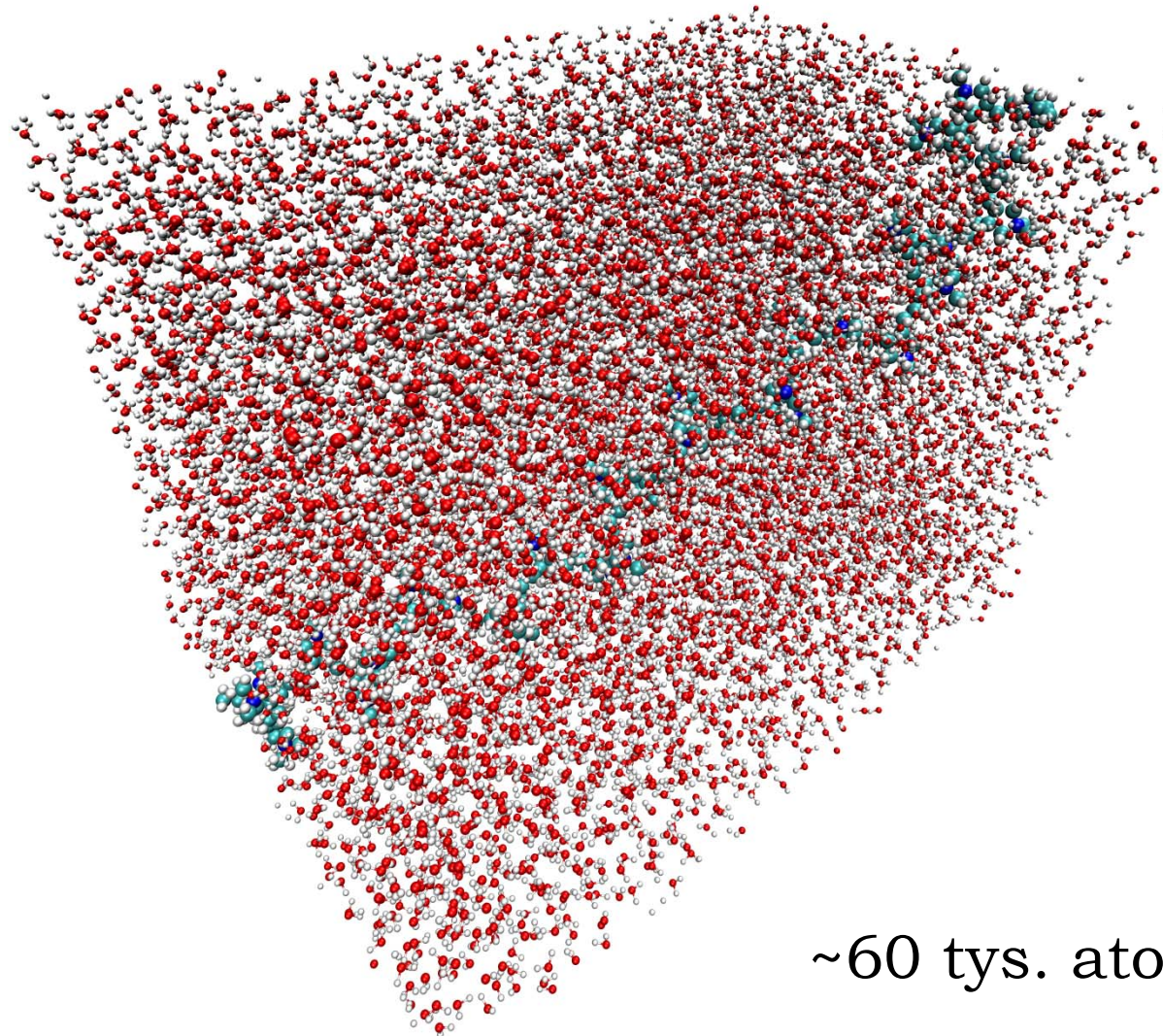


Zatem potrzebujemy:

~500 milionów kroków aby osiągnąć 1 μ s

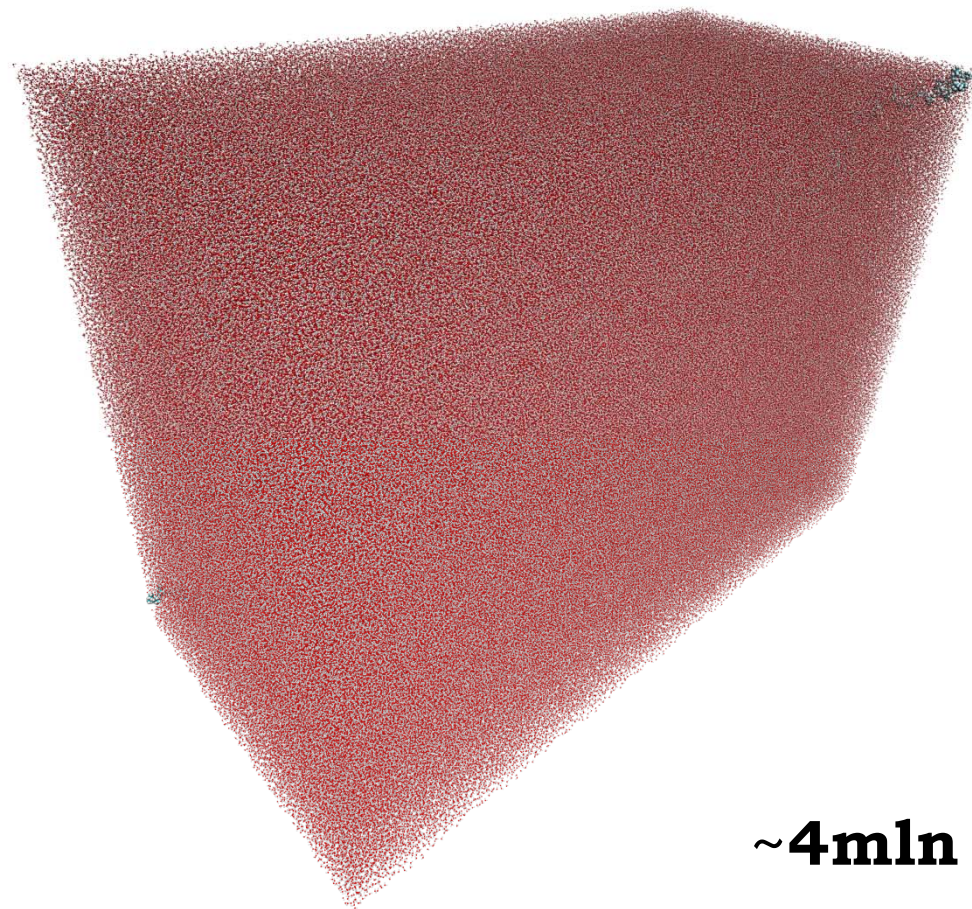


30 - merów



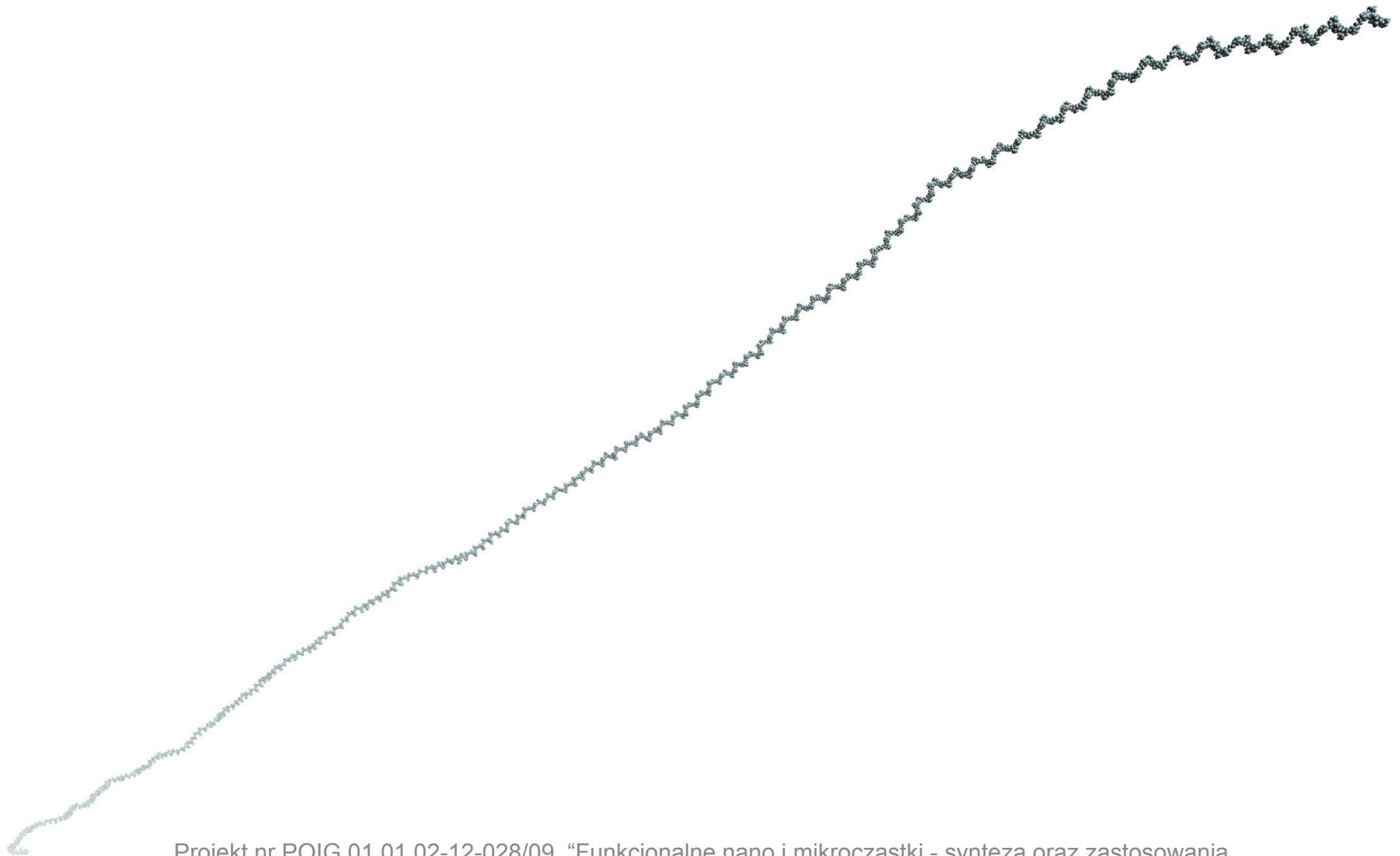
~60 tys. atomów

200 - merów



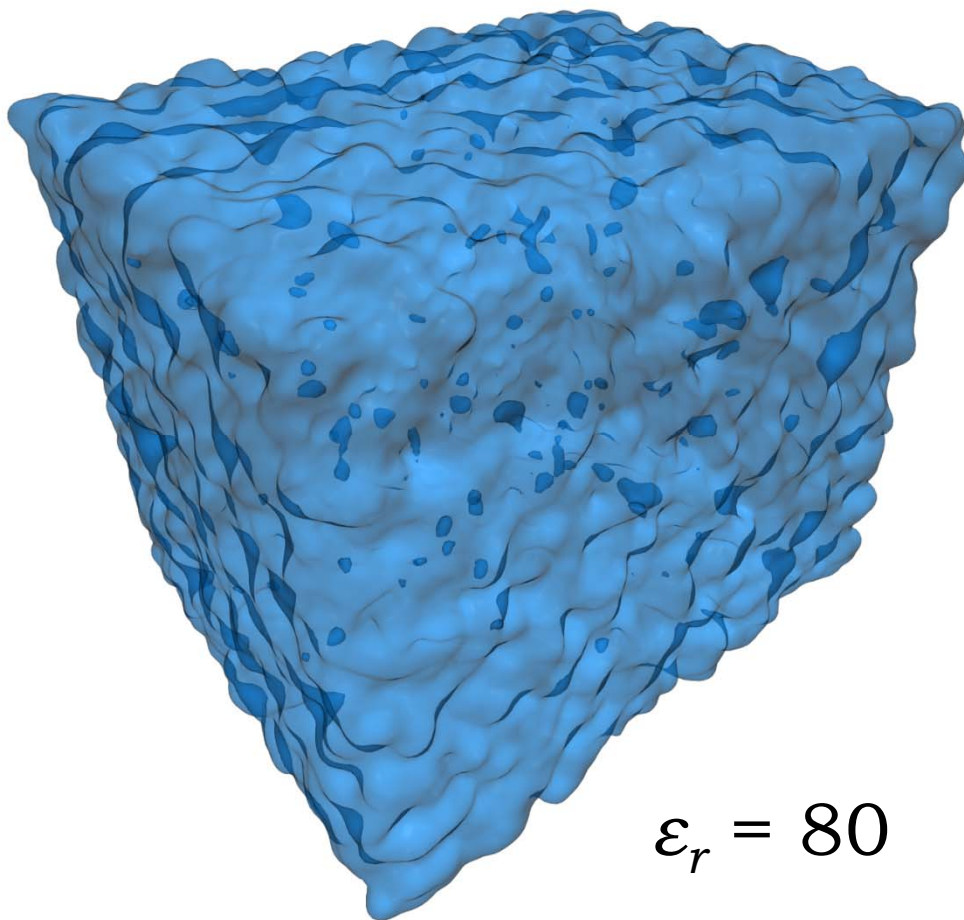
~4mln atomów!

> 600 – merów ?



Projekt nr POIG.01.01.02-12-028/09 "Funkcjonalne nano i mikrocząstki - synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach (FUNANO)"

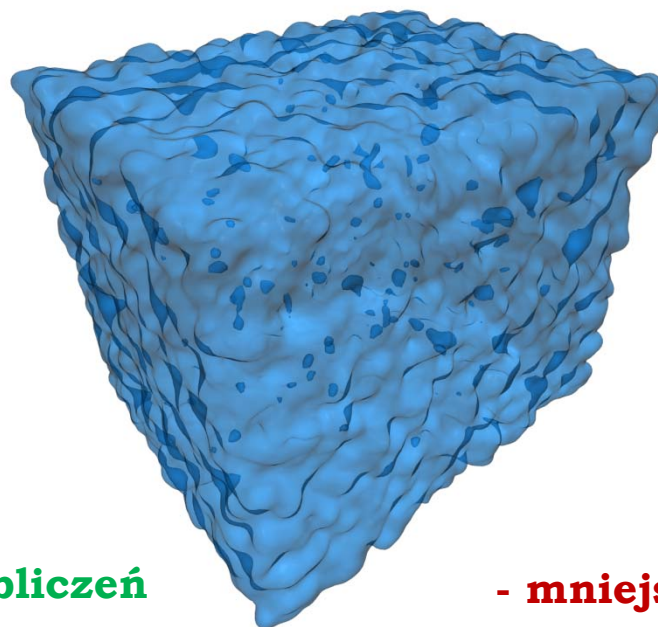
Woda jako medium ciągłe



$$\epsilon_r = 80$$

- eliminujemy obecność cząsteczek wody a efekty związane z obecnością rozpuszczalnika uwzględniamy w inny sposób
- stężenie jonów uwzględniamy poprzez ekranowanie oddziaływań elektrostatycznych

$$\kappa^{-1} = \sqrt{\frac{\epsilon_r \epsilon_0 k_B T}{2N_A e^2 I}}$$



Zalety

- **znaczne przyspieszenie obliczeń**

- efekt porządkany w przypadku symulacji związanych z określeniem konformacji makromolekuł

- rozmiar układu jest nieskończony – unikamy artefaktów związanych z periodycznością

- **możliwość symulacji dużych makromolekuł w roztworach**

Wady

- **mniejsza dokładność**

- efekt nieporządkany gdy interesuje nas kinetyka procesu

- nie uwzględniamy oddziaływań hydrofobowych

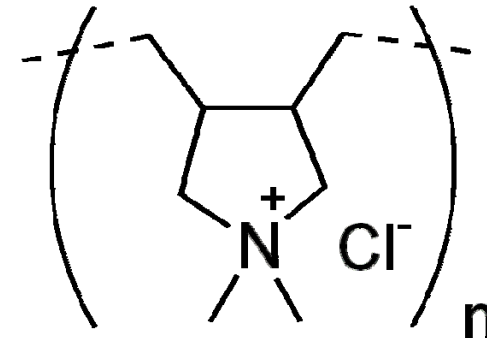
- brak wiązań wodorowych

- brak możliwości obliczania niektórych parametrów, np. współczynnika dyfuzji.

brak wpływu lepkości wody

Konformacja cząsteczki chloreku poli-diallilo-dimetylo-amoniowego (PDADMAC) – weryfikacja

$$I = 10^{-4} - 10^{-3} \text{ [mol/dm}^3\text{]}$$



$$\text{\textit{średnia masa molowa}} = 1.01 \times 10^5 \text{ [g/mol]}$$

$$\text{\textit{masa molowa pojedynczego meru}} = 161.67 \text{ [g/mol]}$$

$$N_m = 625$$

pH = 5.8
 $I = 10^{-3} - 0.1 \text{ [mol/dm}^3\text{]}$

Współczynnik dyfuzji
 (Pomiary DLS)

$$D = 1.3 \times 10^{-7} \text{ [cm}^2\text{/s]}$$

Mobilność elektroforetyczna
 (pomiary mikroelektroforetyczne)

$$\mu_e = 4.2 \text{ [}\mu\text{m cm/(V s)}\text{]}$$

$$N_c = 6.25 \times 10^7 \frac{kT}{D} \mu_e$$

$$\alpha^* = \frac{N_c}{N_m} = 0.13$$

Konformacja cząsteczki PDADMACu – weryfikacja

Program obliczeniowy – **NAMD 2.9** - wsparcie architektury CUDA
- model ciągły rozpuszczalnika pozwalający na uwzględnienie stężenia jonów

Pole siłowe – **CHARMM27**

Ilość monomerów – **625**

Efektywny stopień jonizacji – **13%**

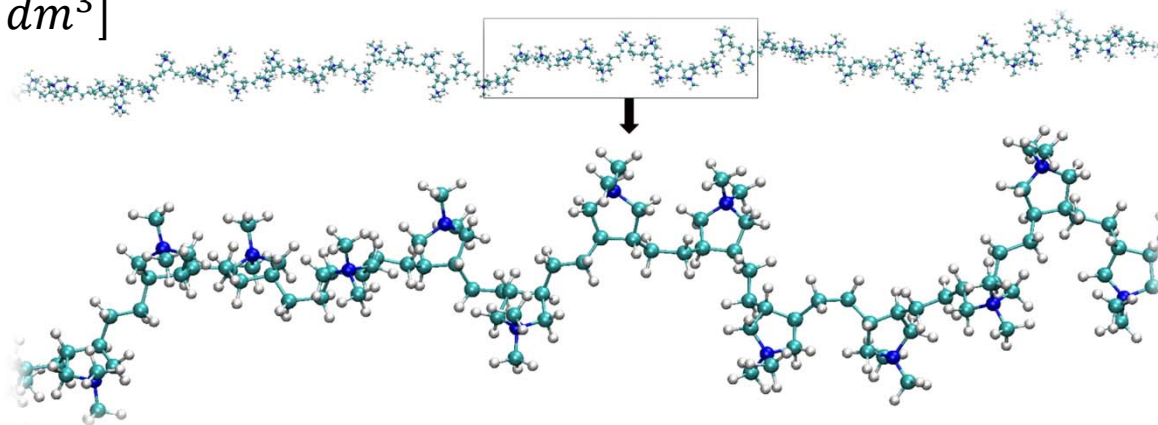
Zasięg oddziaływań elektrostatycznych:

90 [nm] dla $I = 10^{-4}$ [mol/dm³]

30 [nm] dla $I = 10^{-3}$ [mol/dm³]

Temperatura – **298 K**

Krok czasowy – **1.5 fs**



Z. Adamczyk, K. Jamroży, P. Batys, A. Michna, *J. Colloid Interface Sci.* 435 (2014) 182-190

Projekt nr POIG.01.01.02-12-028/09 "Funkcjonalne nano i mikrocząstki - synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach (FUNANO)"

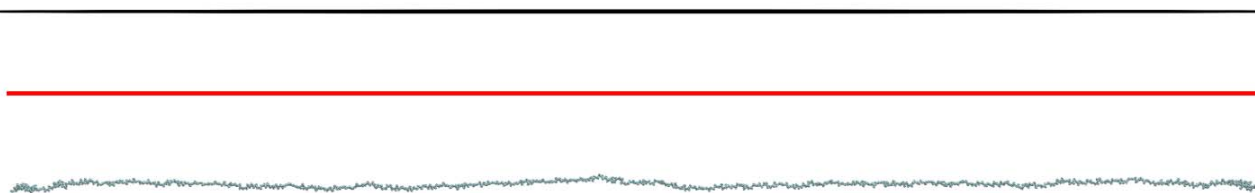
Konformacja cząsteczki PDADMACu – weryfikacja

$$I = 10^{-4} [\text{mol}/\text{dm}^3]$$

$$L_S = 263 [\text{nm}]$$

$$L_C = 230 [\text{nm}]$$

$$L_E = 230 [\text{nm}]$$

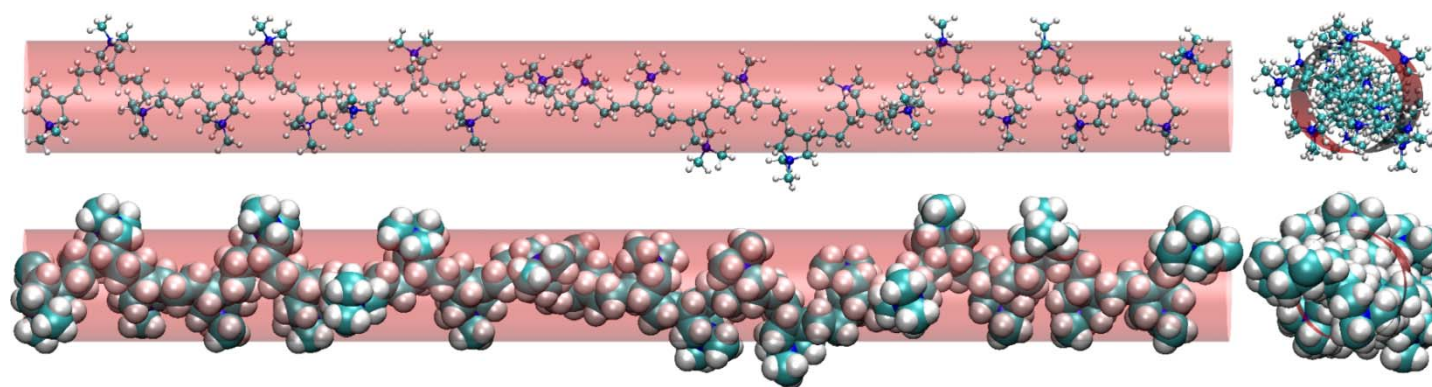
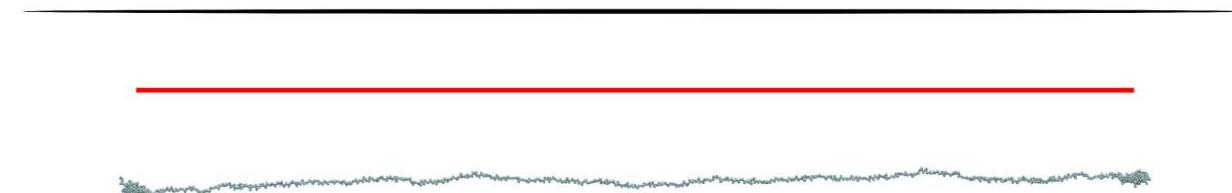


$$I = 10^{-3} [\text{mol}/\text{dm}^3]$$

$$L_S = 208 [\text{nm}]$$

$$L_C = 181 [\text{nm}]$$

$$L_E = 190 [\text{nm}]$$



Pomiary lepkości granicznej

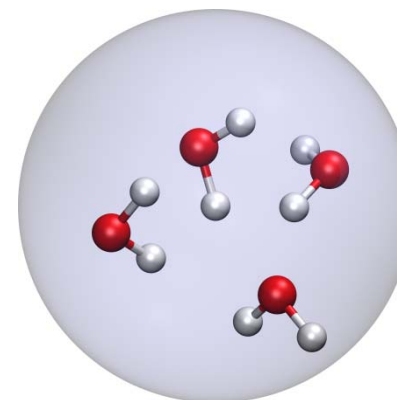
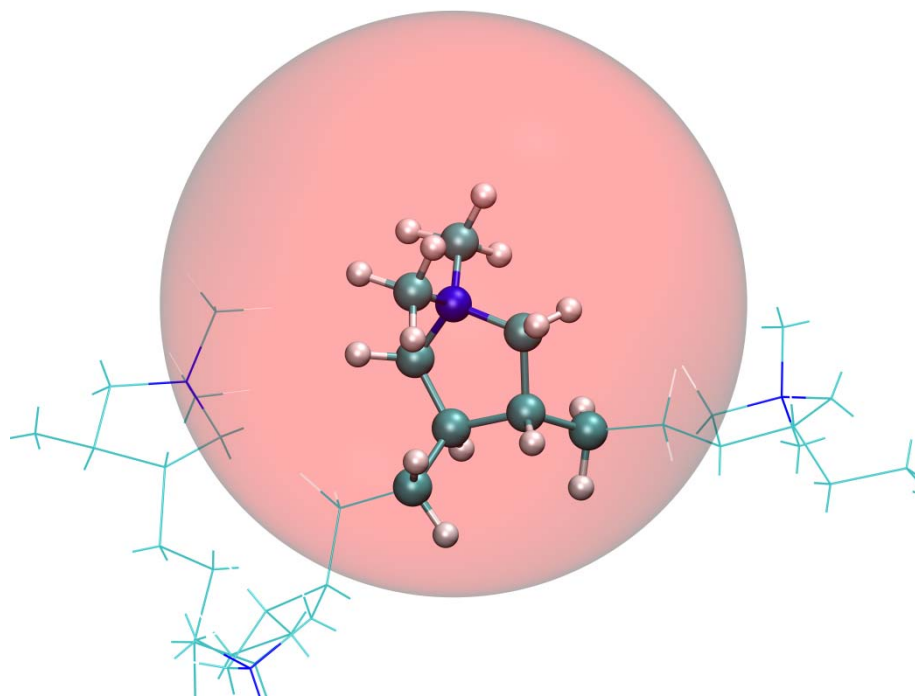


$$d_C = 0.85 [\text{nm}]$$

Z. Adamczyk, K. Jamróży, P. Batys, A. Michna, *J. Colloid Interface Sci.* 435 (2014) 182-190

Projekt nr POIG.01.01.02-12-028/09 "Funkcjonalne nano i mikrocząstki - synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach (FUNANO)"

Dynamika gruboziarnista



LUB

medium ciągłe

Dynamika gruboziarnista

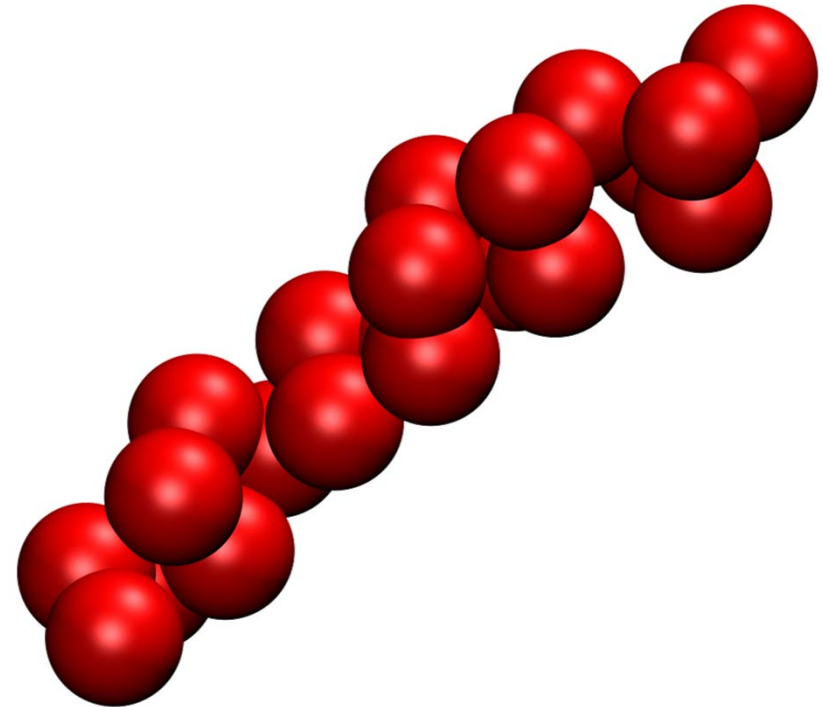
Zalety

- ilość atomów znacznie maleje
- krok czasowy wynosi 20 – 40 fs

Wady

- trudna parametryzacja
- mniejsza dokładność

500 atomów
20 ziaren





**INNOWACYJNA
GOSPODARKA**
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



IKiFP
im. J. Habera
PAN

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO



Dziękuję za uwagę!

Konformacja polielektrolitów w roztworach

P. Batys, K. Jamroży, A. Michna, Z. Adamczyk

***Seminarium sprawozdawcze FUNANO
Kraków, 21.10.2014 r.***