

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΕΝΥΔΑΤΩΜΕΝΩΝ ΝΑΝΟΣΥΝΘΕΤΩΝ ΟΞΕΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ ΜΕ ΠΟΛΥΑΜΙΔΟΑΜΙΝΙΚΑ ΔΕΝΔΡΙΜΕΡΗ

Κ. Στειακάκης*¹, Κ.Καρατάσος¹

¹Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

(*kesteiak@auth.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα εργασία έγινε μελέτη μέσω πλήρως ατομιστικών προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής (MD), νανοσύνθετων συστημάτων πολυαμιδοαμινικών (PAMAM) δεδριμερών και φύλλων οξειδίου του γραφενίου (GO) σε υδατικό περιβάλλον και ουδέτερο pH. Τα τρία συστήματα που μελετήθηκαν είχαν την ίδια κατά βάρος περιεκτικότητα σε GO και διέφεραν στην γενεά και στον αριθμό των μορίων του πολυμερούς. Πιο συγκεκριμένα, οι γενεές που μελετήθηκαν ήταν η 2^η (G2), η 3^η (G3) και η 4^η (G4) με θετικά φορτισμένες μόνο τις αμινομάδες της εξωτερικής υπογενεάς, ενώ τα φυλλίδια του GO έφεραν αρνητικά φορτισμένες καρβοξυλομάδες. Το κάθε σύστημα μελετήθηκε σε 3 θερμοκρασίες (300K, 325K και 350K). Στόχος της εργασίας αυτής ήταν η μελέτη της επίδρασης της θερμοκρασίας και της δενδριτικής γενεάς σε μορφολογικά και δυναμικά χαρακτηριστικά των υπό εξέταση συστημάτων. Όλες οι μοριακές προσομοιώσεις διεξήχθησαν με το πρόγραμμα NAMD^[1] στην ισοβαρή-ισόθερμη (NPT) κατανομή, ενώ το πρωτόκολλο της προσομοίωσης ήταν ανάλογο με αυτό πρόσφατης εργασίας^[2]. Για όλες τις γενεές των δενδριμερών διαπιστώθηκε αύξηση του βαθμού της φυσικής προσρόφηση στην επιφάνεια του GO, με την αύξηση της θερμοκρασίας. Επιπλέον, παρατηρήθηκε μια διαστρωμάτωση των δενδριτικών μορίων 4^{ης} γενεάς σε κατεύθυνση κάθετη στην επιφάνεια των φυλλιδίων του GO. Η χωρική διευθέτηση των φυλλιδίων του GO φάνηκε να εξαρτάται περισσότερο από την γενεά του δενδριμερούς παρά από τη θερμοκρασία. Συγκεκριμένα, παρατηρήθηκε ότι με την αύξηση της γενεάς αυξάνεται και η πιθανότητα σχηματισμού συσσωματωμάτων GO αποτελούμενων από 2 φυλλίδια. Η μελέτη της περιστροφικής κίνησης των δενδριμερών μορίων έδειξε ότι γίνεται γρηγορότερη με την αύξηση της θερμοκρασίας, αλλά και με την μείωση της γενεάς, όπως αναμενόταν. Λεπτομερέστερη ανάλυση για την δυναμική σε τοπική κλίμακα κοντά στη διεπιφάνεια δενδριμερούς/GO βρίσκεται σε εξέλιξη.

Τα μέχρι τώρα αποτελέσματα της εργασίας δίνουν σημαντικές πληροφορίες για τη μικροδομή των συστημάτων PAMAM-GO, τα οποία παρουσιάζουν υψηλό ενδιαφέρον καθώς βρίσκονται υπό μελέτη για χρήση σε περιβαλλοντικές, βιολογικές, ιατρικές και ηλεκτροχημικές εφαρμογές.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η εργασία αυτή πραγματοποιήθηκε μέσω της διάθεσης υπολογιστικού χρόνου από το Ελληνικό Δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας (GRNET) στην εθνική υποδομή HPC – ARIS – στα πλαίσια του έργου “DENDRIGO”.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Phillips, J.C.; Braun, R.; Wang, W.; Gumbart, J.; Tajkhorshid, E.; Villa, E.; Chipot, C.; Skeel, R.D.; Kalé, L.; Schulten, K. (2005), *J. Comput. Chem.* 26:1781-1802.
[2] Karatasos, K.; Kritikos, G. (2018), *Soft Matter* 14:614-627.