

ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΥΔΑΤΙΚΩΝ ΔΙΑΣΠΟΡΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΟΔΡΑΣΤΙΚΩΝ ΜΟΡΙΩΝ ΔΩΔΕΚΥΛΟΘΕΪΚΟΥ ΝΑΤΡΙΟΥ (SODIUM DODECYL SULFATE)

Σ. Δ. Περουκίδης^{1,2*} και Δ. Γ. Τσαλίκης¹

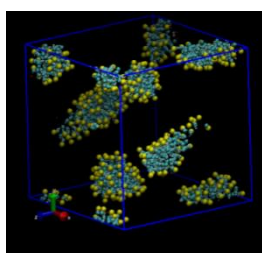
¹Department of Chemical Engineering, University of Patras, Patras GR 26504, Greece

²Hellenic Open University, Patras GR 26222, Greece

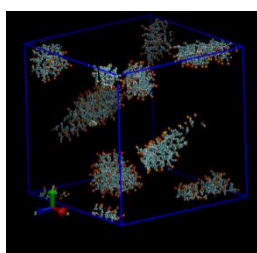
(*peroukid@upatras.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

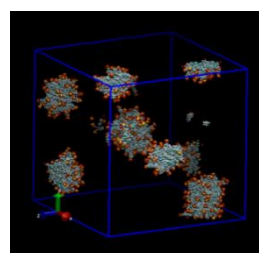
Στην παρούσα εργασία αναπτύσσουμε υπολογιστικά πρότυπα για το σχεδιασμό και την προσομοίωση υδατικών διασπορών που περιέχουν επιφανειοδραστικά μόρια δωδεκυλοθειικού νατρίου (sodium dodecyl sulphate, SDS). Το SDS και παρεμφερή μόρια αποτελούν βασικά συστατικά προϊόντων προσωπικής φροντίδας και υγιεινής. Η αυτο-οργάνωσή τους (self-assembly) που οδηγεί στο σχηματισμό μικκυλίων χαρακτηρίζεται από χρόνους που καλύπτουν πολλές τάξεις μεγέθους και άρα είναι αδύνατον να μελετηθεί με συμβατικές μεθόδους μοριακής προσομοίωσης. Για να υπερβούμε τις παραπάνω δυσκολίες, στην παρούσα εργασία αναπτύσσουμε ιεραρχικές μεθόδους μοντελοποίησης ικανές να λαμβάνουν υπόψη την έκταση σε κλίμακες χώρου και χρόνου που χαρακτηρίζουν τη δομή και τη μοριακή δυναμική των υπό μελέτη υλικών. Η στρατηγική που ακολουθούμε περιλαμβάνει τρία στάδια και συνδυάζει υπολογιστικές προσομοιώσεις κλασσικής μοριακής δυναμικής (molecular dynamics, MD) αδροποιημένων (coarse-grained) και ατομιστικών (atomistic) μοριακών προτύπων. Στο πρώτο στάδιο, πραγματοποιούμε προσομοιώσεις MD για αδροποιημένες μοριακές δομές μορίων SDS χρησιμοποιώντας το πεδίο δυνάμεων MARTINI Force Field. Γίνεται μια συστηματική μελέτη των φυσικών ιδιοτήτων αυτών των συστημάτων με τη διερεύνηση μιας σειράς από χημικές συστάσεις. Σημαντικό σε αυτό το στάδιο είναι η επίτευξη θερμοδυναμικά εξισορροπημένων μοριακών διατάξεων στο κελί προσομοίωσης σε αδροποιημένο επίπεδο. Στο δεύτερο στάδιο, πραγματοποιείται η επαναφορά από το αδροποιημένο στο ατομιστικό επίπεδο. Η διεργασία αυτή ονομάζεται αντίστροφη αντιστοίχιση (back mapping). Στο τρίτο στάδιο, οι αντίστροφα-σχεδιασμένες ατομιστικές προσομοιώσεις, που περιέχουν τώρα στο περιοδικό κελί μιας τουλάχιστον τάξης μεγέθους περισσότερα κέντρα αλληλεπίδρασης (δηλ., εκατομμύρια άτομα) απ' ό,τι οι αδροποιημένες, υπόκεινται σε σχετικά μικρής χρονικής διάρκειας προσομοιώσεις MD χρησιμοποιώντας ευρέως αποδεκτά και επακριβή πεδία δυνάμεων ατομιστικής λεπτομέρειας, όπως το Charmm36 FF.



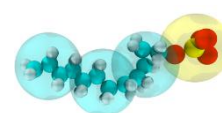
Στάδιο 1: Κελί προσομοίωσης αδροποιημένης λεπτομέρειας



Στάδιο 2: Αντίστροφη αντιστοίχιση



Στάδιο 3: Κελί προσομοίωσης ατομιστικής λεπτομέρειας



Αντίστροφη αντιστοίχιση:

Από 4 σε 42 αλληλεπιδρώντα κέντρα

Η προτεινόμενη μεθοδολογία επιτρέπει την πρόβλεψη σημαντικών φυσικοχημικών ιδιοτήτων του συστήματος (όπως το ιξώδες, ο συντελεστής διάχυσης, το μέγεθος των μικκυλίων κλπ.) που μπορούν να συγκριθούν άμεσα με τις αντίστοιχες, πειραματικά μετρούμενες (όπου υπάρχουν δεδομένα) ή να χρησιμοποιηθούν ως άμεσες προβλέψεις όπως ελήφθησαν απ' ευθείας από την υπολογιστική μεθοδολογία που ακολουθήθηκε και εφαρμόστηκε.