

Modellszámításokkal kapcsolatos kutatások bemutatása

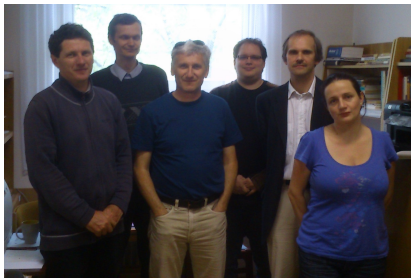
Dr. Boda Dezső

alprojektfelelős
Fizikai Kémiai Tanszék
Pannon Egyetem

boda@almos.vein.hu

2013. május 31.

A kutatócsoport tagjai



Eddigi összteljesítmény: **190** SCI cikk, **425** impakt faktor, **1840** független hivatkozás

Dr. Boda Dezső egyetemi docens (Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék)

Dr. Kristóf Tamás egyetemi docens (Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék)

Dr. Varga Szabolcs egyetemi docens (Fizika és Mechatronika Intézet)

Dr. Valiskó Mónika egyetemi adjunktus (Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék)

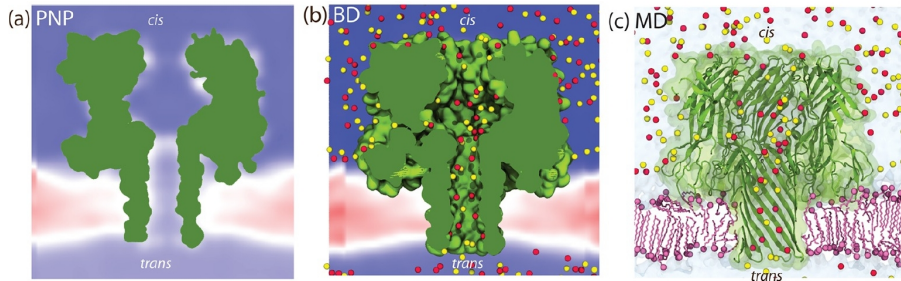
Dr. Gurin Péter egyetemi adjunktus (Fizika és Mechatronika Intézet)

Ható Zoltán PhD hallgató (Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék)

A kutatócsoport tevékenysége

- A bennünket körülvevő világ: **sokrészecskés termodinamikai rendszer**
 - Élő szervezet
 - Technológiai eszközök
 - Modern anyagok
- Ezek makroszkopikus viselkedését mikroszkopikus folyamatok határozzák meg
- **A feladat:** mikroszkopikus folyamatok megértése és számszerűsítése
 - 1 mikroszkopikus modell konstruálása
 - 2 a modell tanulmányozása egy statisztikus mechanikai módszerrel
 - 3 a számított makroszkopikus mennyiségeknek a valósággal való összevetése
 - Ha szükséges, a modell módosítása → 1. lépés (**inverz probléma**)
 - **Predikció**
 - **Költséges kísérletek kiváltása**
- **Vizsgált rendszerek:**
 - szelektív membránok
 - ioncsatornák - nanopórusok („biomimetikus”)
 - anyagásványok (zeolitok, kaolinit)
 - komplex folyadékok (folyadékkristályok)

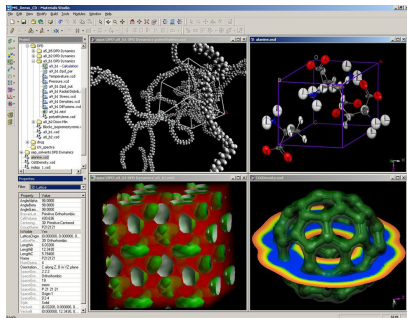
Alkalmazott modellek



Multiskálás modellezés

- Az atomi részletességű modellektől az egyszerűsített, redukált modellekig („coarse-graining”)
- A használt modell a vizsgált jelenség idő és térskálájától illetve a rendelkezésre álló módszerektől függ.

Analitikus elméleti illetve számítógépes szimulációs módszerek



„Gyári” programok

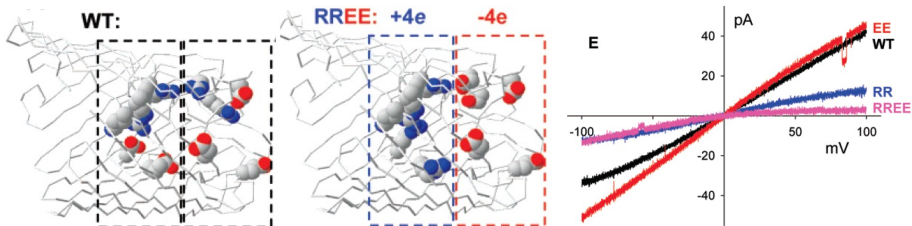
- Materials Studio
- GROMACS

Saját fejlesztésű módszerek (Fortran, C)

- **Monte Carlo** szimuláció (egyensúlyi tulajdonságok)
- **Molekuláris dinamika**, Brown-dinamika (transzporttulajdonságok)
- Új módszerek fejlesztése – hatékony mintavételezési technikák a fenti módszerek ötvözése révén:
- **Local Equilibrium Monte Carlo (LEMC):**
D. Boda, D. Gillespie. Steady state electrodiffusion from the Nernst-Planck equation coupled to Local Equilibrium Monte Carlo simulations. *J. Chem. Theory Comp.*, **8**, 824, 2012.
- **Dynamical Monte Carlo (DMC):**
Z. Ható, D. Boda, T. Kristóf. Simulation of Steady-State Diffusion: Driving Force Ensured by Dual Control Volumes or Local Equilibrium Monte Carlo. *J. Chem. Phys.*, **137**, 054109, 2012.

Egyenirányító ioncsatorna – motiváció: Miedema pontmutációs kísérletei

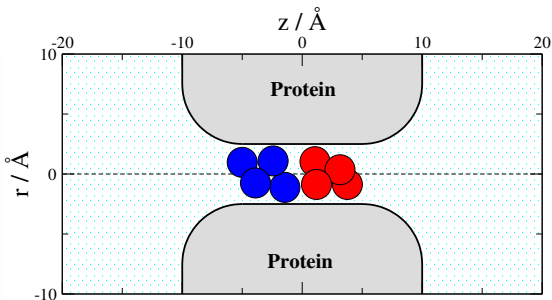
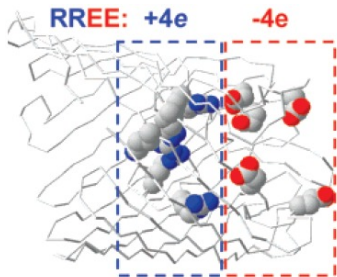
- Egy nem-egyenirányító ioncsatornában (OmpF porin) a pozitív és negatív aminosavakkal játszottak és egy P-N „diódát” alakítottak ki.
- A mutált ioncsatorna (RREE) egyenirányító.



H. Miedema, M. Vrouenraets, J. Wierenga, W. Meijberg, G. Robillard, B. Eisenberg: A Biological Porin Engineered into a Molecular, Nanofluidic Diode, *Nano Letters*, **7**, 2886, 2007

Egyenirányító ioncsatorna – redukált modell

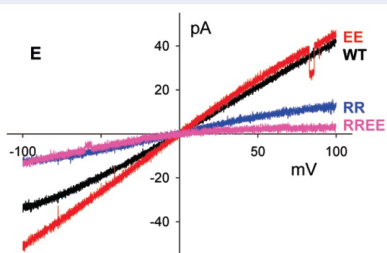
- Egy egyszerűsített modell
- Használt módszer: Nernst-Planck transzportegyenlet LEMC szimulációkhoz csatolva



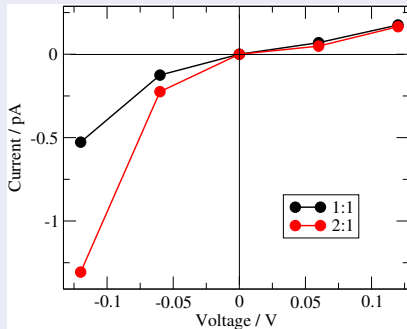
Egyenirányító ioncsatorna – eredmények

- Reprodukáltuk az egyenirányító tulajdonságot

Kísérlet



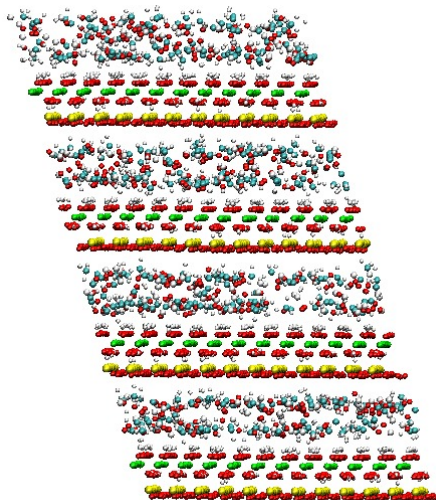
Elmélet



Vendégmolekulák interkalációja rétegszilikátba

Kaolinit

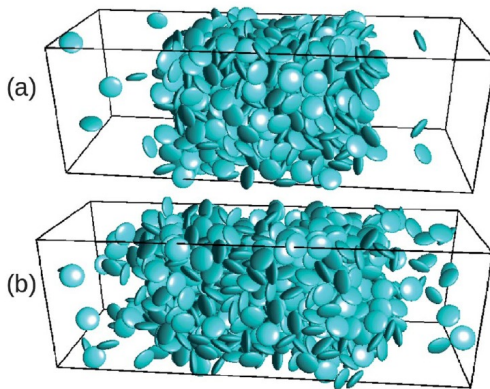
- Részletes atomi szintű modellezés kísérleti adatok alapján paraméterezve (2013)
- Molekuláris dinamikai szimulációk
- Cél: szerkezeti, mechanikai és termodinamikai tulajdonságok meghatározása
- Nagyszámú atom használata (5-6000)



Komplex folyadékok vizsgálata

Elméleti számítások

- Különböző alakú molekulákból álló rendszerek vizsgálata
- Tömbfázisban (fázisegyenúlyok) és pórusban
- Elméleti módszerek használata szimulációval összehasonlítva



Infrastruktúra

Külföldi kapcsolatrendszer

- Universidad Autonoma de Madrid, Spain
- Mexican Petroleum Institute, Mexico City
- Rush University Medical Center, Chicago, USA
- Brigham Young University, Provo, USA
- German Research School for Simulation Sciences, Juelich, Germany
- University of Paderborn, Germany

Számítógép-klaszter: 104 magos, HP Pro-Liant DL360 G5/G6, Ubuntu Linux



Megjelent/beküldött publikációk

- E. Meneses-Juárez, S. Varga, P. Orea, and G. Odriozola. Towards understanding the empty liquid of colloidal platelets: vapour–liquid phase coexistence of squarewell oblate ellipsoids, *Soft Matter*, **9**, 5277, 2013.
- D. Boda, R. Kovács, D. Gillespie, T. Kristóf. Selective transport through a model calcium channel studied by Local Equilibrium Monte Carlo simulations coupled to the Nernst-Planck equation. *J. Mol. Liq.*, in press, 2013. DOI: 10.1016/j.molliq.2013.03.015
- D. Boda, D. Henderson, and D. Gillespie, The role of solvation in the binding selectivity of the L-type calcium channel, *J. Chem. Phys.*, submitted, 2013.