

Εφαρμογή του πεδίου δυνάμεων MARTINI σε αδροποιημένες προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής

Περίληψη

Στα πλαίσια αυτής της εργασίας μελετήθηκε η εφαρμογή και η αποτελεσματικότητα του πεδίου δυνάμεων Martini στις προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής. Το Martini είναι ένα απλοποιημένο και προσαρμόσιμο μοντέλο το οποίο χρησιμοποιείται για την περιγραφή των κύριων φυσικών χαρακτηριστικών συστημάτων αγνοώντας την χημική λεπτομέρεια. Το Martini αναφέρεται στην μεσοσκοπική κλίμακα ($\sim 10 \text{ \AA}$). Χαρακτηρίζεται από μικρότερη λεπτομέρεια και ευκρίνεια σε σχέση με τα ατομιστικά συστήματα ($\sim 1 \text{ \AA}$) καθώς χρησιμοποιεί μικρότερο αριθμό μεταβλητών για να περιγράψει το σύστημα. Είναι δηλαδή αδροποιημένο. Χρησιμοποιεί μια γκάμα βασικών δομικών στοιχείων για να αναπαραστήσει τα διαφορετικά μόρια. Είναι επομένως top-down μοντέλο. Μαζί με τα bottom-up μοντέλα συνιστούν την ευρύτερη κατηγορία των αδροποιημένων (coarse grained) μοντέλων, τα οποία είναι πολύ πιο αποτελεσματικά από άποψη υπολογιστικού κόστους. Παράλληλα καθιστούν δυνατή την μελέτη μεγάλων συστημάτων για διάρκειες οι οποίες να επιτρέπουν την αξιόπιστη και επαρκή δειγματοληψία τους.

Η αποτελεσματικότητα του Martini εξετάστηκε μέσω της μελέτης περιπτώσεων. Αρχικά εφαρμόστηκε σε απλά μονοφασικά συστήματα καθαρών διαλυτών (υδατικών και οργανικών). Υπολογίστηκαν η πυκνότητα και η ισόθερμη συμπιεστότητα. Η σύγκριση τους με αντίστοιχες πειραματικές τιμές δίνει πληροφορίες για τον τρόπο με τον οποίο το μοντέλο διαχειρίζεται μόρια διαφορετικής πολικότητας. Στην συνέχεια εφαρμόστηκε σε διφασικά συστήματα πολικών και μη διαλυτών. Τα συστήματα προσομοιώθηκαν στο ατομιστικό επίπεδο ώστε να παρέχουν ένα μέτρο σύγκρισης. Μελετήθηκε η κατανομή των ειδών γύρω από την διεπιφάνεια με την εξαγωγή των προφίλ πυκνότητας. Επιπλέον υπολογίστηκε η επιφανειακή τάση της διεπιφάνειας και συγκρίθηκε επιπλέον με πειραματικά αποτελέσματα. Αυτές οι προσομοιώσεις παρέχουν σημαντικά συμπεράσματα ως προς την επιτυχή αναπαράσταση των υδροφοβικών φαινομένων. Για την πραγματοποίηση των παραπάνω κατασκευάστηκαν δύο προγράμματα. Το πρώτο επιτρέπει τον υπολογισμό της πυκνότητας στην διεύθυνση της διεπιφάνειας. Το δεύτερο επιτρέπει την στατιστική επεξεργασία δεδομένων με την διαδικασία Block Averaging. Η τελευταία περίπτωση ήταν η εφαρμογή σε συστήματα μη ιονικών αμφίφιλων μορίων και νερού. Εξετάστηκε η ικανότητα πρόρρησης των διαγραμμάτων φάσεων. Στα ίδια συστήματα εφαρμόστηκε η εκδοχή έμμεσου διαλύτη του Martini, το Dry Martini.

Λέξεις κλειδί: Martini, Dry Martini, αδροποίηση, μεσοσκοπικό επίπεδο, μοντελοποίηση αμφίφιλων μορίων, προσομοιώσεις αυτοσυναρμογής

MARTINI force field validation through coarse grain Molecular Dynamics simulations

Abstract

In the present study we examine the applicability and reliability of Martini Forcefield in molecular dynamics simulations. Martini is a simplified and transferrable forcefield which is designed to capture the key physical aspects of molecular systems while neglecting the fine details of atomic level structure. It reaches mesoscopic scale ($\sim 10\text{\AA}$). It's primary feature is the low resolution relevant to atomistic forcefields ($\sim 1\text{\AA}$) since it utilizes fewer degrees of freedom describe the system. It is therefore coarse-grained. It uses a fixed variety of structural units in order to describe the different molecules. This approach is called top down. Along with the top down models, they constitute a new class of coarse-grained model that are much more efficient in computational terms. At the same time, with such models one can simulate large systems and complex processes long enough to ensure that they have been sufficiently statistically sampled.

This efficiency of Martini was challenged in different cases. Initially, it was used for simple pure component solvents (polar and apolar). The density of the systems and their isothermal compressibility were calculated. Their comparison with experimental values provides a valuable insight on the way the particular field handles molecules of different polarity. Afterwards, it was used for the simulation of bimodal systems that consisted from a water and an organic slab. The same systems we modeled at the atomistic level in order to have a mean of comparison. The distribution of the different species around the interface was studied and the density profiles were extracted. These simulations enlighten the way Martini FF represents the hydrophobic effects. The calculation of the aforementioned quantities required the construction of two programs. One of them calculates the density along the bilayer normal. The second one is used in order to statistically process the data obtain from the trajectory of the system with a method called block averaging. Finally, self assembly simulations of aqueous solutions of polyoxyethylene surfactants were performed and the ability of Martini FF to correctly predict their phase diagrams was examined. The same systems were modeled with the implicit solvent version of Martini, known as Dry Martini.

Keywords: Martini Forcefield, Dry Martini Forcefield, coarse-grained, mesoscopic level, simulation of non ionic surfactants, self assembly simulations