

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στα πλαίσια της διπλωματικής εργασίας αυτής μελετήθηκε η εφαρμογή του πεδίου δυνάμεων Martini σε προσομοιώσεις μεμονωμένων αδιατάρακτων αλυσίδων πολυμερούς στο αδροποιημένο επίπεδο, με τη μέθοδο Monte Carlo. Το Martini είναι ένα απλοποιημένο μοντέλο που χρησιμοποιείται για την αναπαράσταση και την περιγραφή των φυσικών χαρακτηριστικών συστημάτων όπως τα πολυμερή, το οποίο όμως αγνοεί τη χημική λεπτομέρεια. Η αναπαράσταση των μεμονωμένων αδιατάρακτων αλυσίδων πολυμερούς με τη μέθοδο Monte Carlo και η εκτίμηση των ιδιοτήτων διαμόρφωσής τους, όπως ο χαρακτηριστικός λόγος του Flory, η απ' άκρο εις άκρο απόσταση και η μέση γυροσκοπική ακτίνα αποτέλεσε το κύριο αντικείμενο της εργασίας.

Τα συστήματα που μελετήθηκαν στην παρούσα διπλωματική εργασία κατασκευάστηκαν μέσω του υπολογιστικού πακέτου MAPS και αναπτύχθηκε η αδροποιημένη αναπαράστασή τους με το πεδίο δυνάμεων Martini.

Ο αλγόριθμος Monte Carlo για μεμονωμένες αδιατάρακτες αλυσίδες που αναπτύχθηκε από τους Tzounis, Anogiannakis και Theodorou τροποποιήθηκε και επεκτάθηκε κατάλληλα, έτσι ώστε να δέχεται συστήματα στο αδροποιημένο επίπεδο, αντί για το ατομιστικό, και να χρησιμοποιεί αδροποιημένα πεδία δυνάμεων. Στη συνέχεια τα συστήματα που ήταν προς μελέτη εξισορροπήθηκαν πλήρως. Μέσω αυτών των προσομοιώσεων παράχθηκαν πληροφορίες που έχουν να κάνουν με τις ιδιότητες διαμόρφωσης των πολυμερικών αλυσίδων, το χαρακτηριστικό λόγο του Flory, τη δυσκαμψία δηλαδή που εμφανίζουν τα προς μελέτη πολυμερικά συστήματα, και τη γυροσκοπική ακτίνα. Μέσω υπολογισμών, προέκυψαν τα τελικά αποτελέσματα και ακολούθησε σύγκριση των αποτελεσμάτων με προσομοιώσεις Monte Carlo μεμονωμένων αδιατάρακτων αλυσίδων στο ατομιστικό επίπεδο, αποτελέσματα από προσομοιώσεις πολυμερικών τηγμάτων στο αδροποιημένο επίπεδο και, τέλος, με πειραματικά δεδομένα.

ABSTRACT

In the present thesis, the application of the Martini force field in simulations of single unperturbed polymer chains modeled at a mesoscopic level was studied, using the Monte Carlo method. Martini is a simplified model used to represent and describe physical features of polymers, while ignoring the chemical details. Sampling individual polymer chains using the Monte Carlo method and estimating conformational properties of the polymer, such as Flory's characteristic ratio, the mean squared end-to-end distance and the mean squared radius of gyration was the focus of the present work.

Initial configurations for the systems studied in this thesis were generated using the MAPS [29] software, and their coarse-grained representation was developed with the Martini force field.

The Monte Carlo algorithm for single unperturbed polymer chains developed by Tzounis, Anogiannakis and Theodorou was appropriately modified in order to read and accept systems represented at the coarse-grained level, rather than the original atomistic. Subsequently, the systems studied were simulated and fully equilibrated. Through these simulations, useful information about the conformational properties, such as the characteristic ratio of Flory, which quantifies the stiffness of a polymer chain, and the radius of gyration were generated. Through computations, the final results were produced, which were then compared to results from single unperturbed chain Monte Carlo simulations at the atomistic level, results from polymer melt simulations at the coarse grained level and, finally, to experimental data.