

 Zawartość zarchiwizowana w dniu 2024-06-18

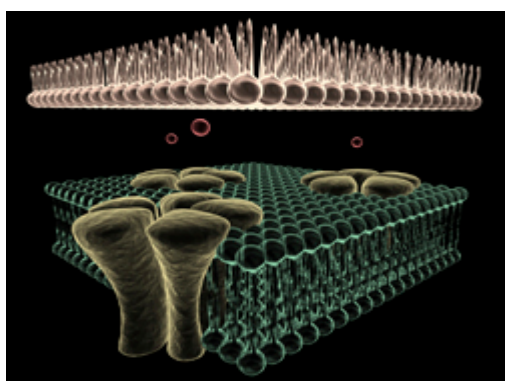


The origin of excess charge at the water/hydrophobic interfaces

Wyniki w skrócie

Dokładne modele pola sił do roztworów jonowych

Znajomość zasad przepływu jonów jest niezbędna przy tworzeniu rozwiązań biotechnologicznych i wyrobów farmaceutycznych. Nowe modele termodynamiczne powinny ułatwić badanie tego zjawiska i projektowanie odpowiednich rozwiązań.



© Thinkstock

Większość hydrofobowych materiałów polimerowych nie posiada grup funkcjonalnych lub reaktywnych na swoich powierzchniach. Mimo to na styku z masą wodną, na przykład roztworem soli fizjologicznej, wytwarzają one silny ładunek ujemny. Mimo intensywnych badań prowadzonych w ostatnich dziesięcioleciach nie udało się wyjaśnić tego zjawiska. Jednak konsekwencje takich zdarzeń są szczególnie istotne w przypadku przepływów stymulowanych elektrycznie, na przykład transportu jonów przez kanałki biologiczne.

Uczestnicy finansowanego ze środków UE projektu EXCHARGEHYD badali adsorpcję soli na takich stykach, uwzględniając termodynamicznie spójne siły pola w jonach za pomocą metod dynamiki molekularnej. Zdefiniowanie dokładnych pól sił jest trudne i wymaga modelu umożliwiającego jednocześnie opisanie zachowania

kilku zbiorczych (termodynamicznych) właściwości roztworów jonowych. Jednakże wiele parametrów pól siły kationów dwuwartościowych o znaczeniu biologicznym, takich jak magnez (Mg^{2+}), wapń (Ca^{2+}), bar (Ba^{2+}) i stront (Sr^{2+}) jest najczęściej opartych na właściwościach pojedynczych jonów.

Uczeni opracowali parametry pól sił tych jonów w rozszerzonym modelu wodnym prostego ładunku punktowego (SPC/E). Zoptymalizowane pola sił dokładnie opisują właściwości termodynamiczne pojedynczych jonów w wodzie. W celu poprawy dokładności w modelu uwzględniono także wszelkie zaobserwowane doświadczalnie odchylenia od idealnego zachowania w skończonych stężeniach jonów.

Przewidywania uzyskane na podstawie modelu oceniono pod względem właściwości wody w kontakcie z powietrzem oraz z hydrofobową samoorganizowaną monowarstwą. Zbadano wpływ jonów na stabilność białka w czystej wodzie oraz wodnych roztworach soli, aby zidentyfikować roztwory od działania denaturantu.

Dotychczas, ze względu na złożoność interakcji, żaden pojedynczy dynamiczny model molekularny nie opisywał dokładnie szerokiego zakresu zachowań jonów. Dokładne symulacje opracowane w ramach projektu EXCHARGEHYD wnoszą zatem istotny wkład w biotechnologię i projektowanie leków.

Znajdź inne artykuły w tej samej dziedzinie zastosowania



Odzysk i ponowne wykorzystanie metali szlachetnych z przetworzonych odpadów elektronicznych

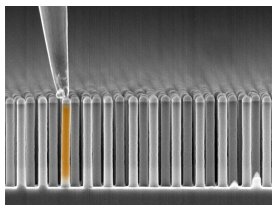
7 Czerwca 2024



Tworzenie wytrzymałych bioplastików kompozytowych z myślą o ich łatwiejszym demontażu

7 Kwietnia 2025





Krzemowe ogniwa słoneczne otrzymują ładunek z górnych warstw z nanoprzewodami

26 Lipca 2019



Biotworzywa z drewna

24 Września 2018



Informacje na temat projektu

EXCHARGEHYD

Identyfikator umowy o grant: 253181

Projekt został zamknięty

Data rozpoczęcia

1 Grudnia 2010

Data zakończenia

30 Listopada 2012

Finansowanie w ramach

Specific programme "People" implementing the Seventh Framework Programme of the European Community for research, technological development and demonstration activities (2007 to 2013)

Koszt całkowity

€ 216 782,00

Wkład UE

€ 216 782,00

Koordynowany przez

FREIE UNIVERSITAET BERLIN



Germany

Ostatnia aktualizacja: 24 Października 2013

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/91944-accurate-force-field-models-for-ionic-solutions/pl>

European Union, 2025

