Molekulare Interaktionen auf Nanometer genau erfassen

Wir präsentieren hier den Nanotechnologen Arbeitsvorschläge der Molekularen Dynamik Simulation (MD) zur Einführung in dieses Gebiet. Mit dem Bottom-up Konzept von MD konstruieren wir Systeme bis einige 100 Nanometer auf biologischem, physikalischem und chemischem Wissen. Mit MD können dynamische Vorgänge von molekularen Interaktionen jeden Augenblick wie vom Hubschrauber aus beobachtet werden.

Dr. Lukas D. Schuler, Dr. Christian D. Berweger

Vorteile

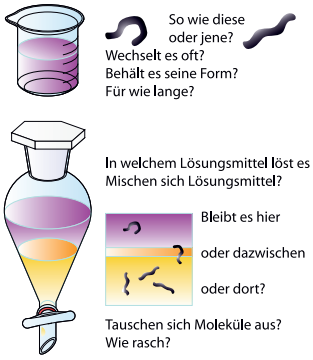
unsichtbar wird sichtbar
Konzepte überprüfen
Seltenes eintreten lassen
Extreme studieren

Nutzen

keine unnützen Synthesen
Effekte endlich erklären
Outsourcen an Spezialisten
Coaching durch MD Experte

Beobachten…

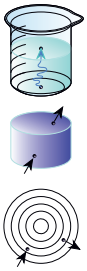
gelöste Strukturen



… Strukturen in aggregiertem Zustand

… atomares Sorptions- oder Adhäsions-Detail

… Diffusion in komplexem Material



Welche Zeitabhängigkeit von den Flüssigkeitseigenschaften, z.B. der Viskosität, ergibt die Simulation?

Wie wandern kleine Moleküle durch poröse Materialien wie Polymere oder Gele? Werden sie absorbiert?

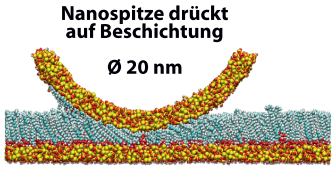
Welchen Einfluss haben geladene Partikel oder elektrische Felder auf die Diffusion?

All diese Simulationen sind machbar …

- im Vergleich zum Experiment und zur Validierung
- mit jedem einzelnen Atom in Bewegung sichtbar
- in für Experimente unerreichbaren Räumen
- ohne Marker-Moleküle
- ohne Messgeräte (es sind Berechnungen).

Nahansicht

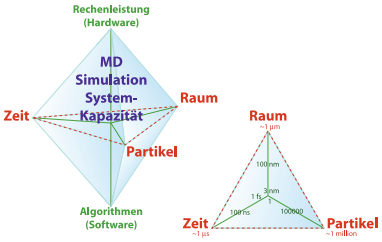
mit MD Simulation



Eine 10 nm-Radius-Silikatspitze in Kontakt mit einem Silikatsubstrat, das für eine Studie von Reibung und Verschleiss mit einer selbstordnenden Schicht von Alkylsilanen bezogen ist. Die Momentaufnahme zeigt Deformation und Schaden der Beschichtung durch die Spitze.

Nanotribology of Anti-Friction Coatings in MEMS
M. Chandross, C. D. Lorenz, G. S. Grest, M. J. Stevens, and E. B. Webb III
Journal of Minerals, Metals, and Materials (JOM), 57, 55 (2005).

Kapazität wächst für MD Simulationen

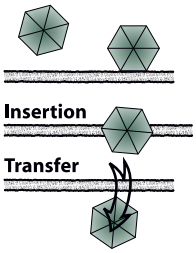


Die Molekulare Dynamik Simulation System-Kapazität wird nur durch die Rechenleistung und effiziente Berechnungsalgorithmen begrenzt. Das Verlangen nach mehr simulierter Zeit, Raum und Partikel ist in einem magischen Dreieck verbunden, welches durch die Höhe der Bipyramide begrenzt wird.
Die Systemgrenze des magischen Dreiecks wächst jedes Jahr in Nanometern, Nanosekunden und einigen Hunderttausend Partikeln.
Schnellere Prozessoren, Parallelisierung, mehr Speicher und Netzrechner führen zur Simulation von Mikrosekunden, Mikrometern und Millionen von Partikeln in atomarer Auflösung.

Vorgeschlagene MD Studien

Kann ein Nanopartikel durch eine Zellmembran dringen?

Adsorption/Adhäsion



Auf Knopfdruck kann eine Dynamik virtuell induziert werden und die beteiligten Energien lassen sich bis ins Detail studieren.

Konzeptskizze einer Nanopartikel Beurteilung in einer biophysikalischen Umgebung durch Molekulare Dynamik Simulation als Vortest für teure toxikologische Untersuchungen.

Eine Zellmembran sollte als Flüssigkristall und elastisch-porös erkannt werden.

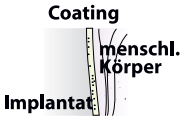
Computer simulation study of fullerene translocation through lipid membranes. J. Wong-Ekkabut, S. Baoukina, W. Triampo, I. Tang, F. D. Tieleman, L. Monticelli, University of Calgary
Nat Nanotechnol. 2008 Jun; 3 (6):363-8

Die Eigenschaften einer Implantat-Oberfläche optimieren

Klinische Tests oder Tierversuche sind teuer und streng reguliert und sollten auf das nötige Minimum reduziert werden.

Implantation

Eine klinische Vision ist die Kontrolle der Immunreaktion des menschlichen Körpers mit einer optimalen Medikamentenabgabe durch das Coating bis die Entzündung abklingt.



Wie ist die Medikamentenfreisetzung kontrollierbar?

1. Medikamentenabgabe des Containers
2. Medikament diffundiert durch das Coating
3. Medikament wird im Körper freigesetzt

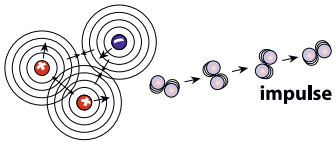
Physikalische Eigenschaften der Barrieren können simuliert und im Detail studiert werden, um Kontrollen der Freisetzungsrate zu finden.

MD Methode

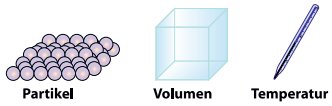
baue die Moleküle nach

wende Physik und Chemie an

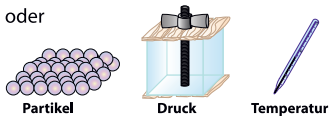
potentielle Energie kinetische Energie



thermodynamische Randbedingung



oder



Chemische Eigenschaften werden durch empirische Potentiale aller beteiligten Atome definiert. Physikalische Gesetze werden befolgt, so wie die Newtonschen Bewegungsgleichungen, Energieerhaltung und Geschwindigkeitsverteilung für die Temperatur. Die Dynamik wird in kleinen Zeitschritten im Bereich von 10^{-15}s integriert.

Wissensbasierter Vorschlag, Folgerungen

Die MD Methode[1] hat sich in akademischen Gruppen über Jahrzehnte etabliert, wird jedoch von Newcomern nicht leicht zufriedenstellend eingesetzt. Sie funktioniert auf der Skala von atomaren Kraftmikroskopen und anderen Nano-Tools. Ihre Zeitskala reicht von Femtosekunden bis zu einigen 100 Nanosekunden.
Manchmal geraten Experimente sehr gut und werden dennoch nicht wirklich verstanden. Molekulare Interaktionen sind ein Schlüssel zum Verständnis zugrundeliegender physikalischer Kräfte und der Leistungsfähigkeit des chemischen Aufbaus. Computersimulationen vermeiden überflüssige Synthesen durch Beurteilung von Derivaten oder anderer Bedingungen wie Druck, Temperatur oder Konzentration. Andererseits können experimentelle Werte überprüft werden.[2] Proben können in kleinsten Räumen studiert werden, wo jede Messmethode Störungen induzieren würde. Adhäsion oder Aggregation sind dynamische Vorgänge und sind nur durch dynamische Beobachtung mit hoher zeitlicher Auflösung zu verstehen. Wo Messungen das Bild nicht auflösen können wie in der Strukturdynamik in Flüssigkeiten, Diffusion in Nanoporen, oder bevorzugten Sorptions-Konfigurationen an Oberflächen, ist MD das beobachtende und schlüssige Mittel. In der Theorie ist die Anwendung von MD nur durch die Anzahl Partikel und somit die Rechenleistung, Speicher und Ausfallsicherheit der Methoden begrenzt. In der Praxis scheitert die Anwendung von MD oft an der mangelnden Expertise.
Wir empfehlen Experimentalisten Simulationsexperten als Partner. Simulationsexperten bieten sich an, Hand in Hand mit Experimentalisten das Know-how in R&D zu mehren und Designfragen schneller zu lösen. Sie können Forscher über neue und aufkommende Simulationsmethoden beraten und deren Fragen durch komplementäre Ansätze angehen oder sie anleiten die theoretischen Methoden für eigene Bedürfnisse zu lernen.

[1] L. Schuler, Simulation News Europe 2008, in press
[2] L. D. Schuler, X. Daura and W. F. van Gunsteren, J. Comput. Chem. 2001, 22, 1205-1218

xirrus simulation

xirrus GmbH, Buchzelgstr. 36, 8053 Zürich, Switzerland · www.xirrus.ch · info@xirrus.ch · +41 44 741 01 74

xirrus GmbH ist ein zuverlässiger Technologiepartner für Molekulare Dynamik (MD) Simulation, der Ihnen folgende Dienste bietet:

- Unterstützt Ihre R&D durch detailreiche Einblicke in nanoskalige Räume durch Bottom-up Computersimulationen.
- Hilft überflüssige Synthesen vermeiden durch Evaluation wichtiger molekularer Interaktionen vor der Laborarbeit.
- Rasche Interpretation von Simulations-Modellen und -Resultaten durch unsere Experten.
- Hand–in–Hand Entwicklung von Systemen mit Ihren Experimentalisten.
- Unterstützt Sie mit neuen Methoden und Coaching gemäss Ihrem Bedarf.

Dr. Christian D. Berweger und Dr. Lukas Schuler haben in MD promoviert und sind erfahren in Umsetzung, Softwareentwicklung, Analyse und Qualitätssicherung von Modellen und Simulation für nanoskalige und andere partikelbasierte Systeme. Sie sind Mitglied der Arbeitsgemeinschaft Simulation (ASIM).

2001 Gründung der xirrus GmbH
2005 Entwicklung von «ximulon» für Simulations-Dienstleistungen
2006 Prozessmanagement für Finanzberatung von hochriskanten Anlagen
2007 Simulationen zur Verbesserung des FLARM-Funkprotokolls
C. D. Berweger, L. Schuler, segelfliegen 3 (2008) 30-33