

Τίτλος: Υπολογιστική Μελέτη Νανοσύνθετων Πολυμερικών Συστημάτων με Ομοιοπολικά Οργανικά Πλαίσια (COF) μέσω Προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής

Περιγραφή

Στόχος της παρούσας μελέτης είναι η αξιοποίηση των διακριτών ιδιοτήτων δύο οικογενειών υλικών, των Ομοιοπολικών Οργανικών Πλασίων (COF) και των Συζευγμένων Πολυμερών (CP), για τη δημιουργία ενός νανοφορέα φαρμάκων με πορώδη και φθορίζοντα χαρακτηριστικά. Η αποτελεσματικότητα του νέου υβριδικού νανοφορέα, θα διερευνηθεί μέσω ατομιστικών προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής. Για τη δημιουργία των μοντέλων των CPs και των COFs πρέπει να επιλεγούν και να χρησιμοποιηθούν κατάλληλα πεδία δυνάμεων για την περιγραφή των διαμοριακών και ενδομοριακών αλληλεπιδράσεων σε όλα τα άτομα. Αυτό θα γίνει με βάση την υπάρχουσα εμπειρία σε μοριακές προσομοιώσεις, την βιβλιογραφία και τις συγκρίσεις με πειραματικά δεδομένα, που παράγονται στο πλαίσιο του τρέχουσας μελέτης. Στη συνέχεια θα πραγματοποιηθούν λεπτομερείς ατομιστικές προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής (ΜΔ), χρησιμοποιώντας αλγόριθμους ΜΔ τελευταίας τεχνολογίας. Πιο συγκεκριμένα, μείγματα CPs και COFs θα προσομοιωθούν σε νερό και πληροφορίες σχετικά με δομικές και διαμορφωτικές ιδιότητες θα μελετηθούν, αναλύοντας τα δεδομένα προσομοίωσης και θα εξεταστεί η δυνατότητα σχηματισμού νανωσωματιδίων.

Προαπαιτούμενες γνώσεις

Γνώσεις Γενικής Φυσικής και Μαθηματικών; Γενικές γνώσεις Προγραμματισμού; Γενικές γνώσεις Μοριακής Δομής της Ύλης; Γενικές γνώσεις Φυσικής Στερεάς Κατάστασης

Μαθησιακά αποτελέσματα

- Ατομιστικές προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής.
- Μοντελοποίηση Μοριακών Συστημάτων
- Μελέτη βασικών ιδιοτήτων των Υλικών
- Ανάλυση αποτελεσμάτων
- Εκμάθηση τρόπων παρουσίασης αποτελεσμάτων στο πλαίσιο ερευνητικής εργασίας.

Υπεύθυνος καθηγητής

Η εργασία θα πραγματοποιηθεί στο Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών.

Δρ. Αναστασία Ρισάνου

Email: trissanou@eie.gr

Τηλ. Επικοινωνίας: 6947821656