

Streszczenie

Hydrofobowość jest zjawiskiem, które ma ogromne znaczenie w wielu dziedzinach nauki i jest przedmiotem badań od kilkadziesiąt lat wielu grup z całego świata. Oddziaływania hydrofobowe występują pomiędzy cząsteczkami lub grupami niepolarnymi w środowisku wodnym. Substancje hydrofobowe charakteryzują się niskim powinowactwem do rozpuszczalnika. Ważną rolę tego oddziaływania można zaobserwować w wielu procesach zachodzących w roztworach wodnych np. kompleksowaniu, agregacji surfaktantów, koagulacji. Są one także kluczowymi siłami napędowymi procesów, takich jak tworzenie miceli czy fałdowanie białek.

W prezentowanej pracy doktorskiej został zbadany wpływ siły jonowej, temperatury, kształtu i rozmiaru badanych cząstek na oddziaływania hydrofobowe. Przeprowadzono symulacje dynamiki molekularnej (MD) w polu siłowym AMBER 16.0 dziesięciu homodimerów związków, a dokładniej: metanu, neopentanu, adamantanu, fulerenu, etanu, propanu, butanu, heksanu, oktanu, dekanu. Na podstawie wyników symulacji MD wyznaczono potencjały średniej siły dla wszystkich układów uwzględniając siły jonowe wynoszące 0; 0,04; 0,08; 0,40 mol/dm³, a dodatkowo dla dwóch układów (adamantan i heksan) rozszerzono ten zakres o wyższe wartości, tj.: 1,0; 1,5; 2,0 mol/dm³, które są daleko poza zakresem fizjologicznych wielkości. Badany zakres temperatur obejmował wartości: 248, 273, 285, 298, 310, 323, 335, 348, 360, 373 K. W pierwszej fazie przeprowadzono symulacje MD w temperaturze 298 K w dwóch modelach wody TIP3P oraz TIP4PEW. Dodatkowo wyznaczono mapki funkcji rozkładu gęstości wody oraz średniej liczby wiązań wodorowych między cząsteczkami wody w dwóch minimach dla heksanu oraz adamantanu w sile jonowej równej 0 oraz 0,4 mol/dm³. W badaniach określono również zmiany parametrów termodynamicznych oddziaływań hydrofobowych, a dokładniej zmiany energii swobodnej Gibbsa, entalpii, entropii i pojemności cieplnej.

Zaobserwowano, iż siła jonowa ma różny wpływ na oddziaływania hydrofobowe w zależności od kształtu i wielkości cząsteczek, a także badanej temperatury. Wpływa ona również na kształt krzywych potencjału średniej siły.