

Fluid határfelületek vizsgálata számítógépes szimulációval

Jedlovsky Pál

*Eszterházy Károly Egyetem,
Kémiai és Élelmiszerkémiai Tanszék Tanszék,
3300 Eger, Leányka utca 6*



Vázlat

- Fluid határfelületek modellezésének alapkérdései

- Ízelítő a csoportunkban több évtizede folyó számítógépes határfelületi kutatások eredményeiből:

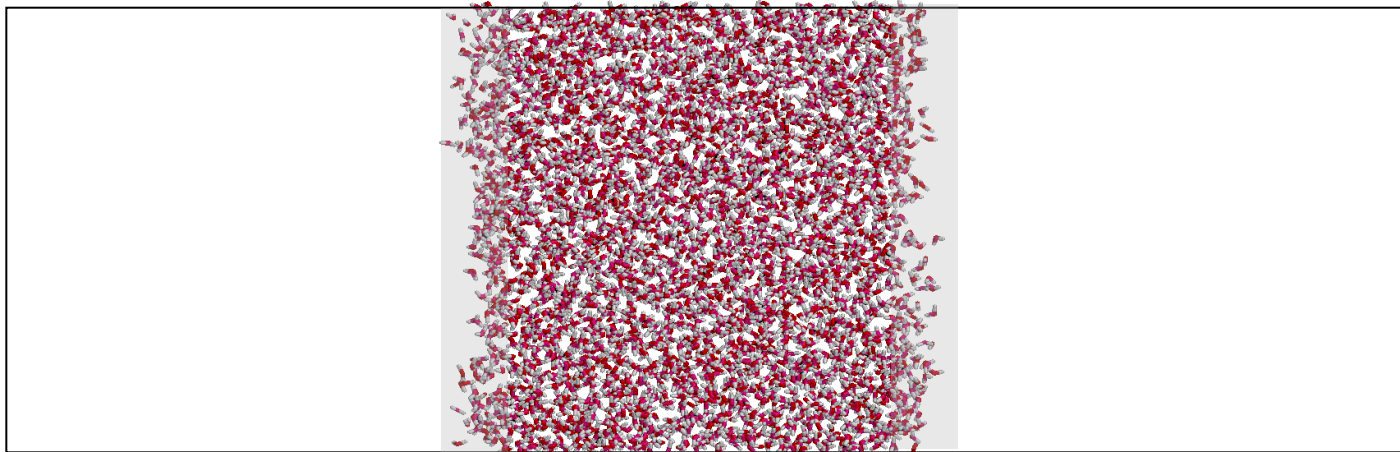
- Mit mondhatunk a 'HCN Világ' elméletről?
- Hogyan oszlik meg a felületi feszültség az egyes felszín alatti molekuláris rétegek közt?
- Hogyan kötődik meg a PEO a víz felületén, és hogyan szorítja le onnan a NaDeS?

Határfelület

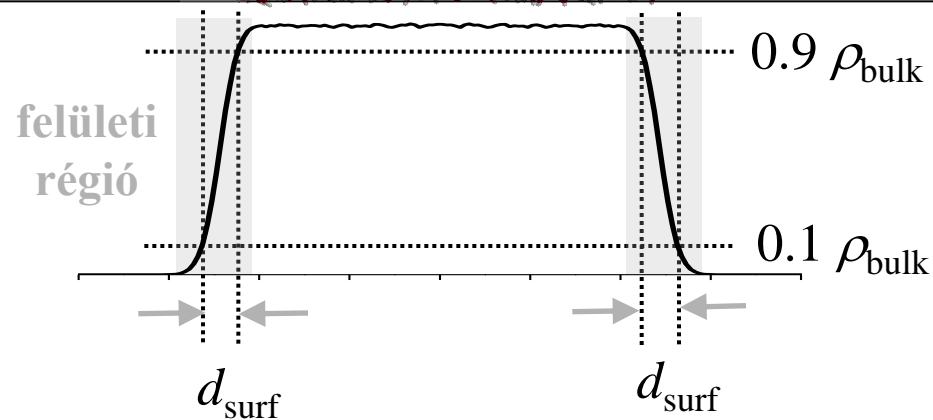
gőzfázis

folyadékfázis

gőzfázis



Sűrűségprofil:

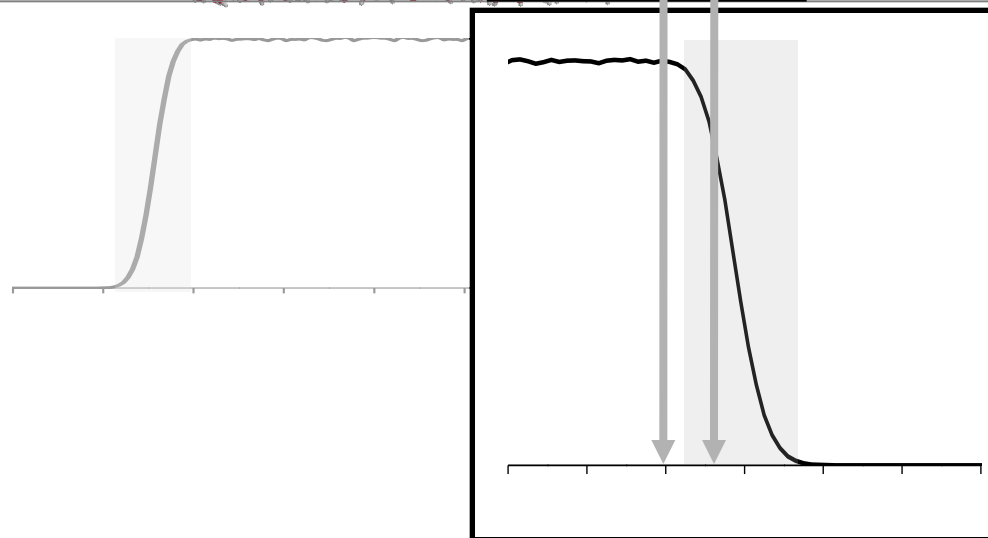
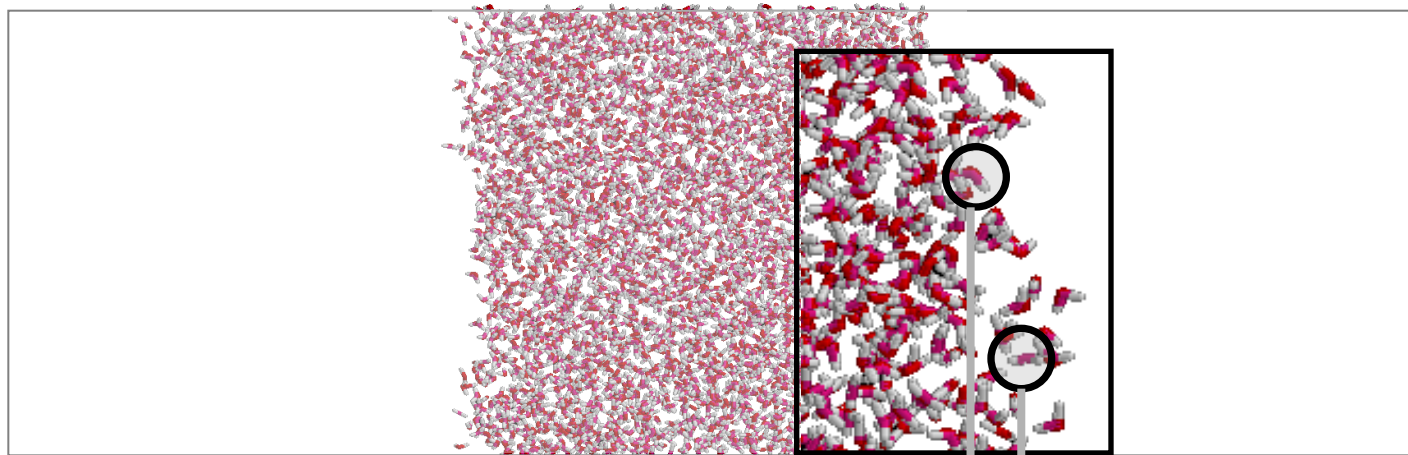


Határfelület

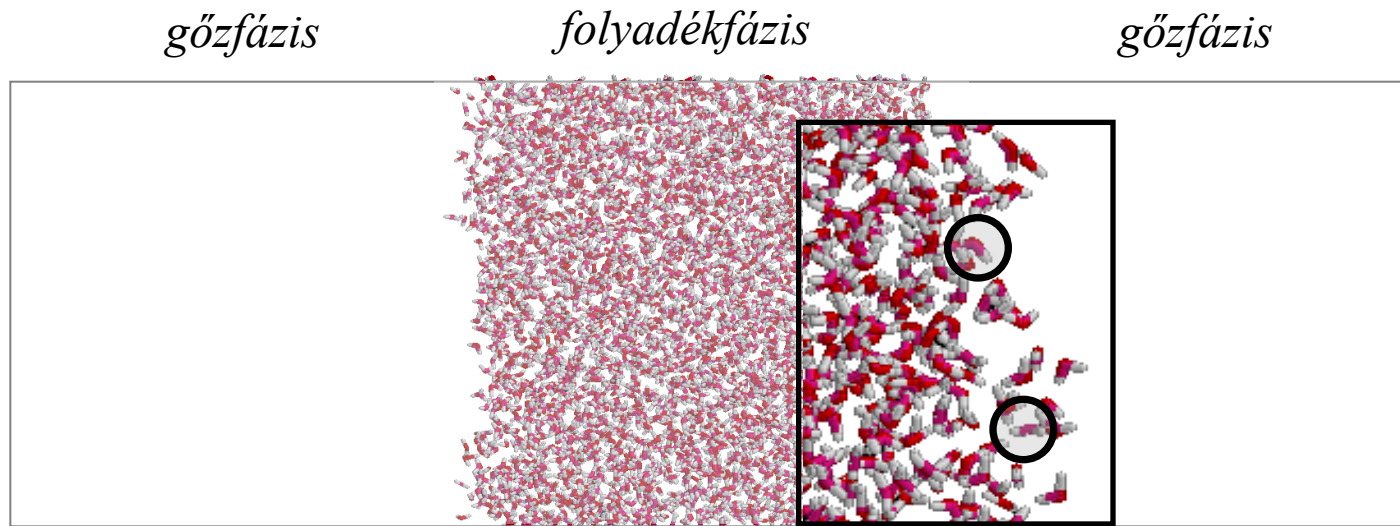
gőzfázis

folyadékfázis

gőzfázis



Határfelület

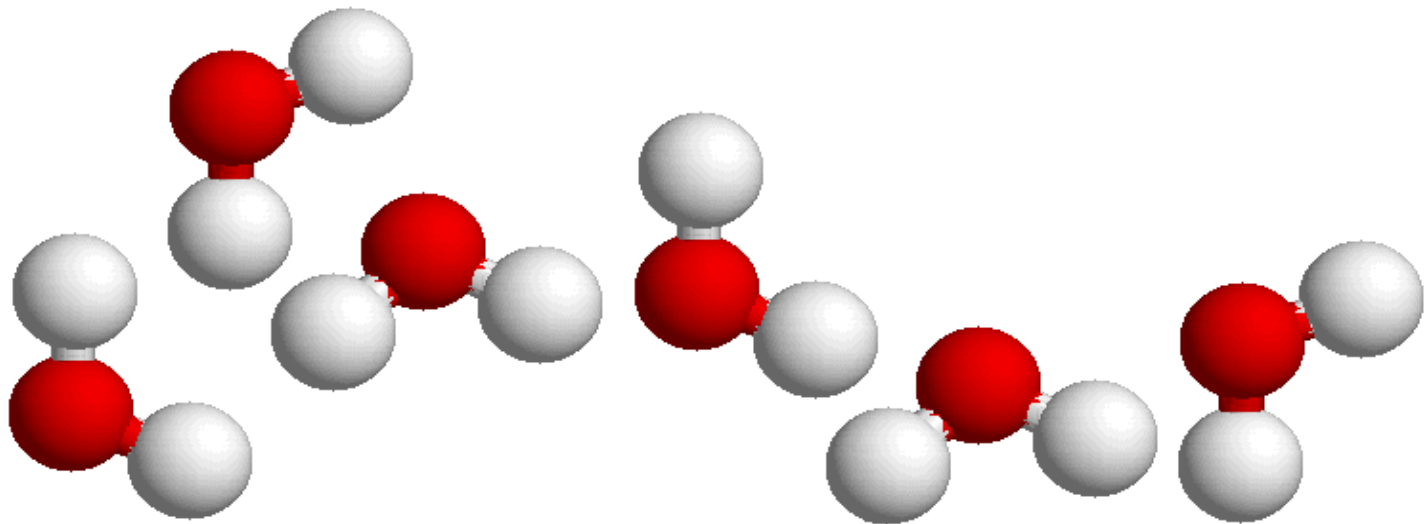
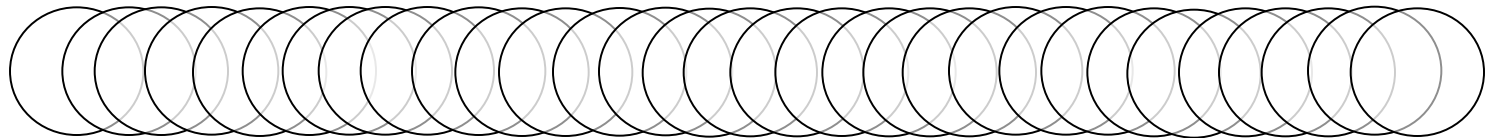


Dolgozzunk ki egy módszert amivel egyértelműen kiválaszthatjuk a felületi molekulákat, és lehetővé teszi a határfelület szerkezetének vizsgálatát.

ITIM (Identification of the Truly Interfacial Molecules)

Az ITIM módszer

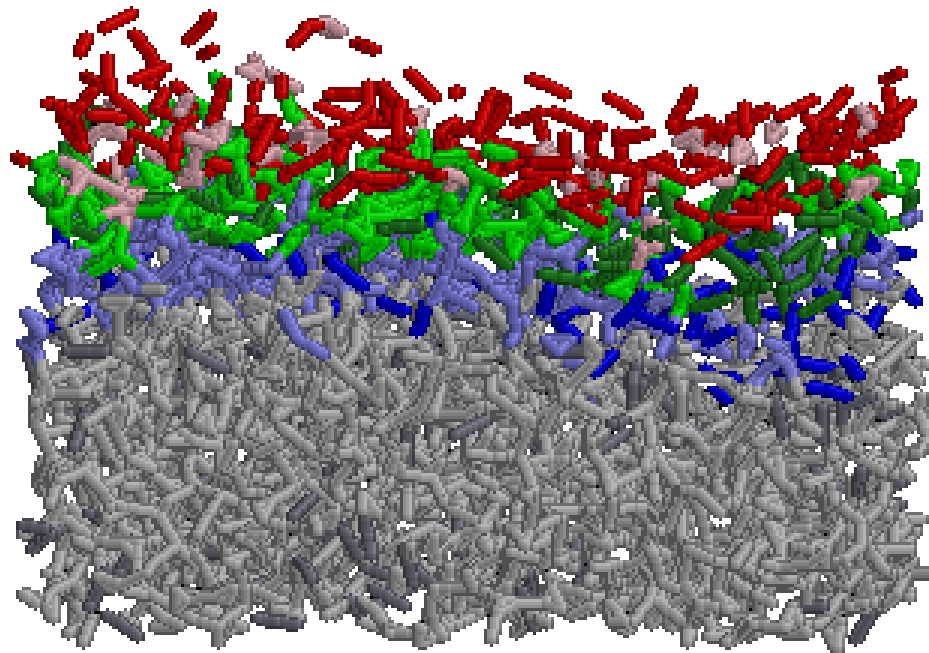
Próbagolyót ejtünk a felületre, arra merőleges tesztvonalak mentén
amelyik molekulán “megakad” a próbagolyó, az felületi



Tömbfázis

Az ITIM módszer

Az első rétegbelinek talált molekulák eltávolításával és az eljárás megismétlésével a második (harmadik, stb.) réteg molekulái is azonosíthatók



A 'HCN Világ' elmélete

Mi volt előbb

a tyúk

vagy a tojás?

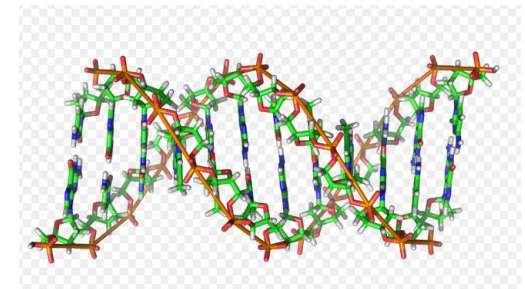
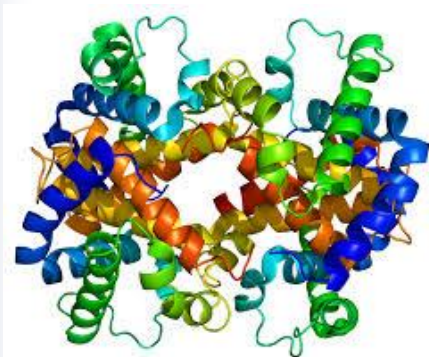


a fehérjék

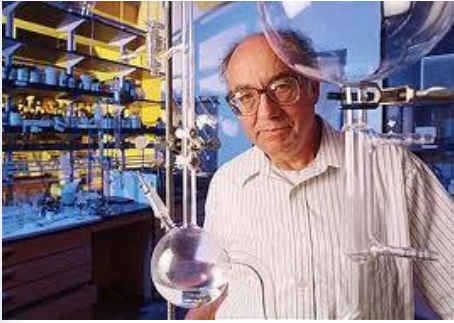
vagy a DNS?

(szintetizálják a DNS-t)

(kódolják a fehérjéket)



A 'HCN Világ' elmélet



(1930-2007)

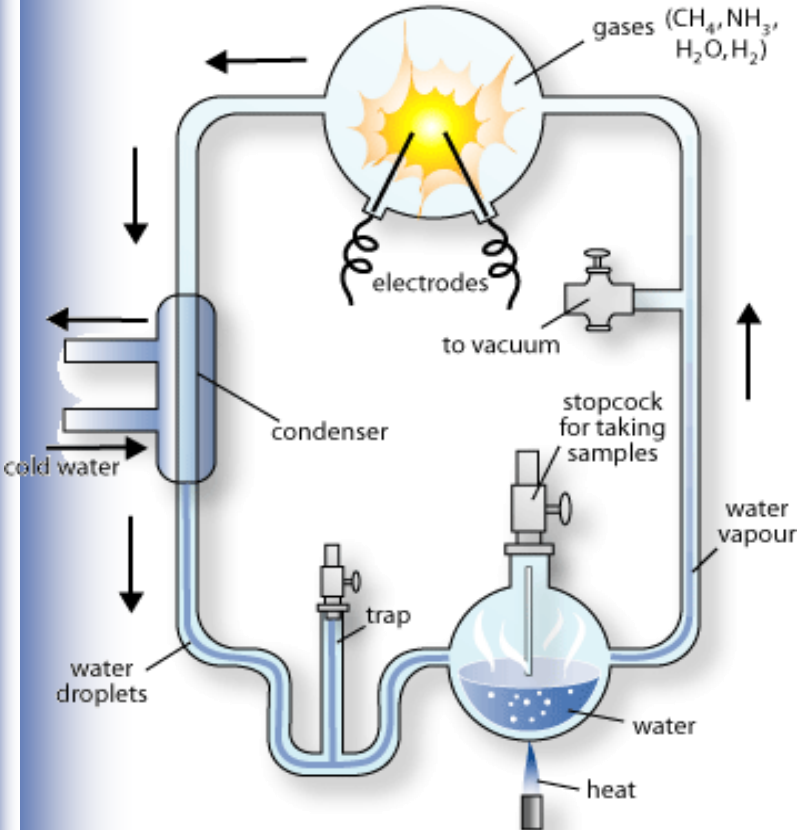
A Miller kísérlet



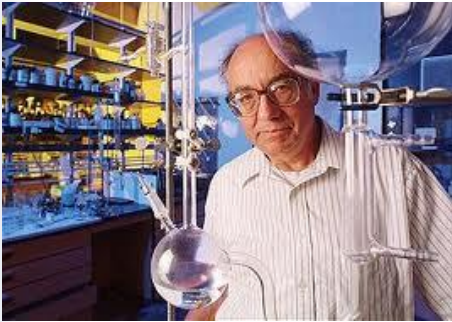
- őseles hozzávalókkal

- villámlások

- a víz körforgása

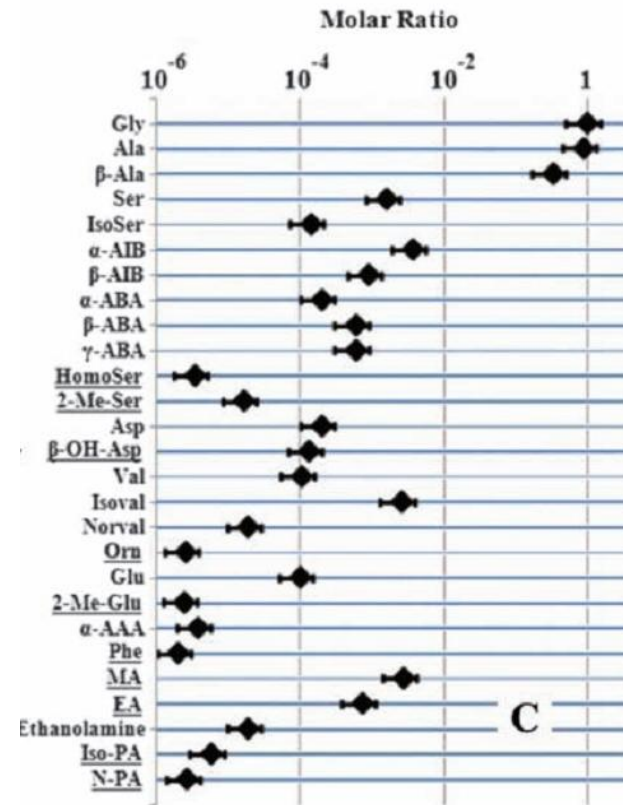
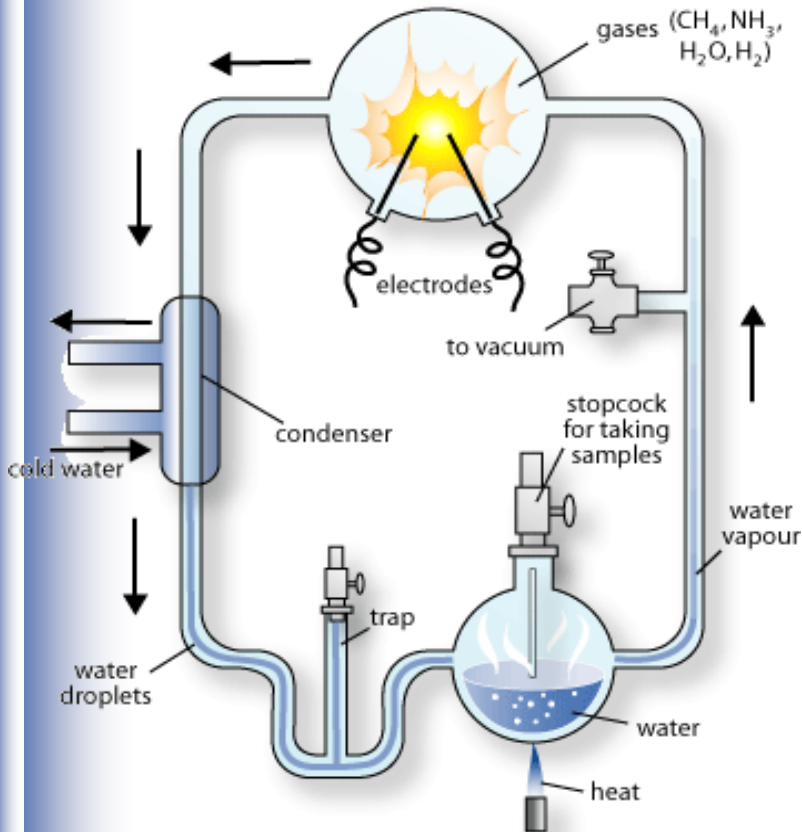


A 'HCN Világ' elmélet



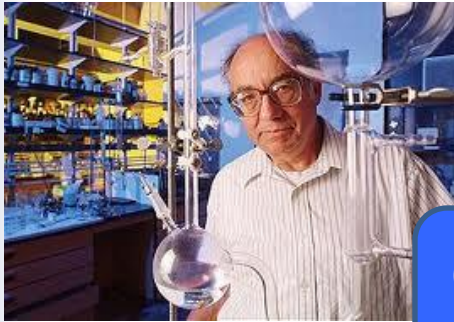
(1930-2007)

A Miller kísérlet



Johnson, A. P.; Cleaves, H. J.; Dworkin, J. P.; Glavin, D. P.; Lazcano, A.; Bada, J. L. *Science*, **2008**, 322,404.

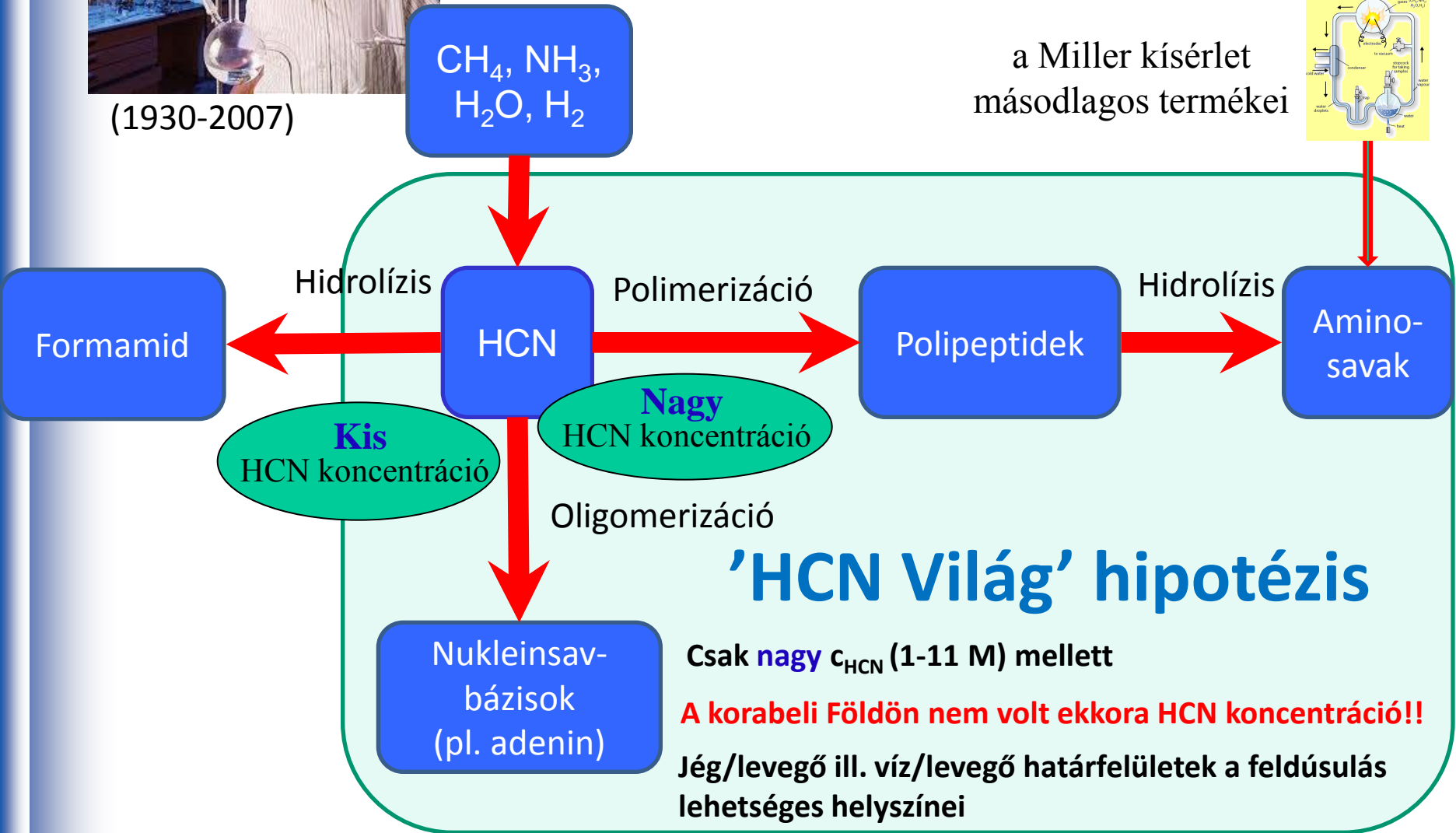
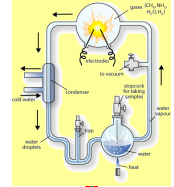
A 'HCN Világ' elmélete



(1930-2007)

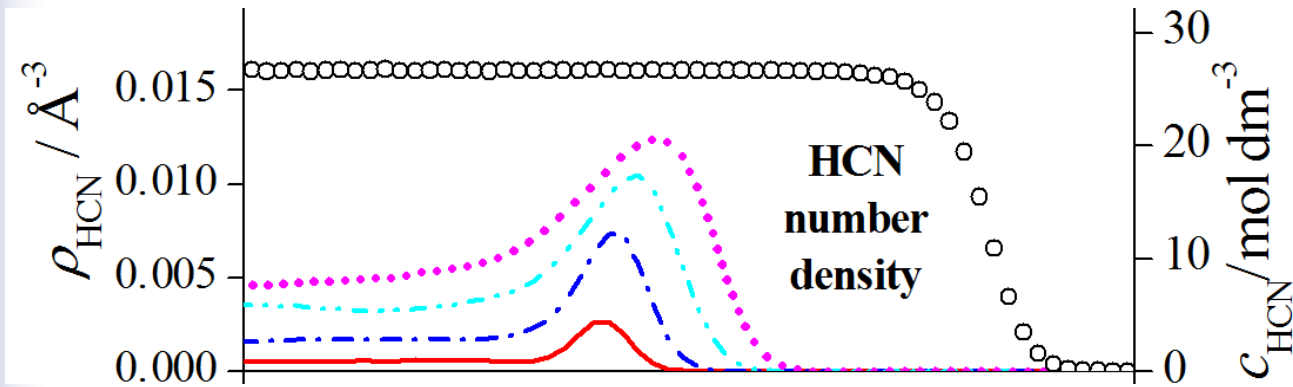
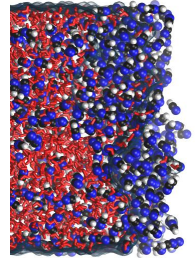
A Miller kísérlet

a Miller kísérlet
másodlagos termékei

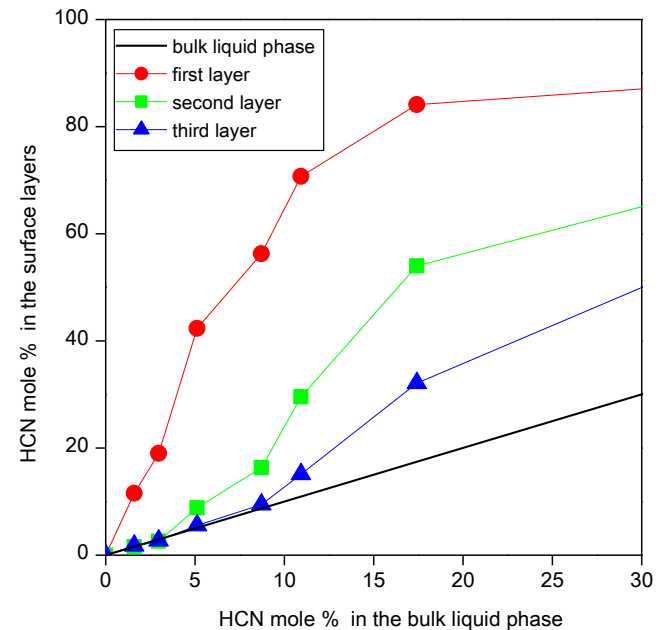


A 'HCN Világ' elmélet

Feldúsulás a felületen

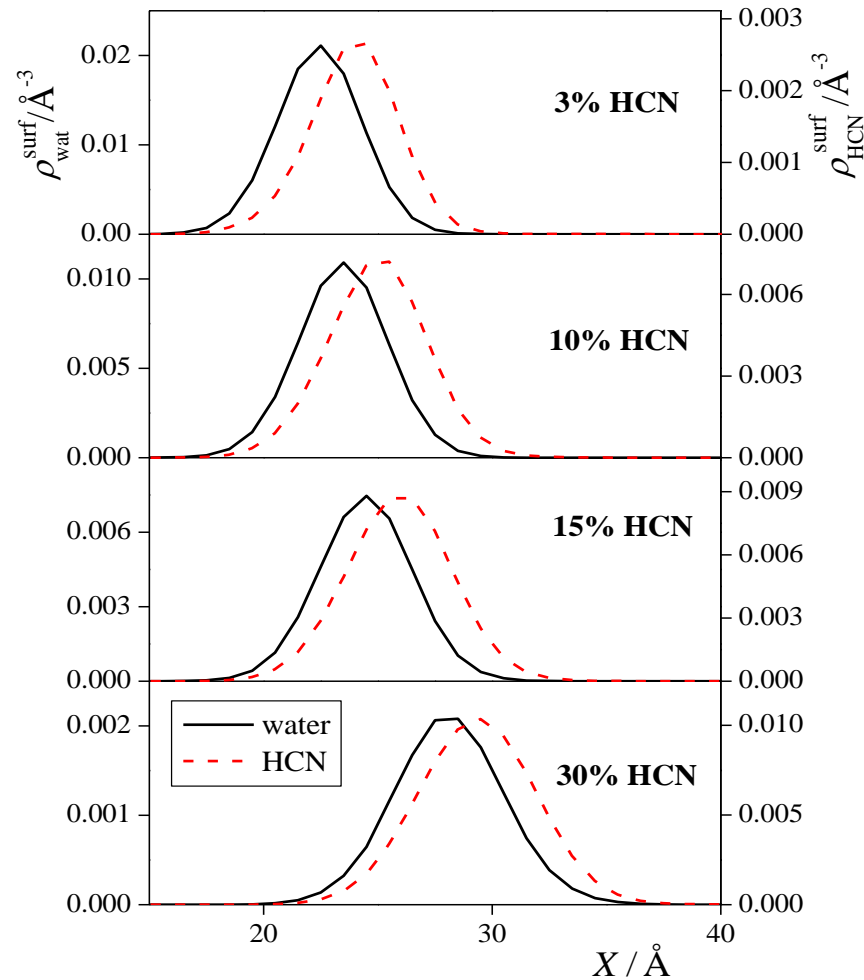


| Mol% | $c_{\text{HCN,bulk}} / \text{M}$ | $\frac{c_{\text{HCN,1st layer}}}{c_{\text{HCN,bulk}}}$ |
|------|----------------------------------|--|
| 5% | 0.8 | 1:7.2 |
| 10% | 2.8 | 1:8.3 |
| 20% | 4.5 | 1:6.5 |
| 30% | 5.5 | 1:6.5 |



A 'HCN Világ' elmélete

Feldúsulás a felületen



- HCN jelentősen feldúsul a felületen, és ez a feldúsulás több rétegre is kiterjed
- a HCN molekulák a felületi rétegen belül is "feljebb" helyezkedik el mint a vízmolekulák

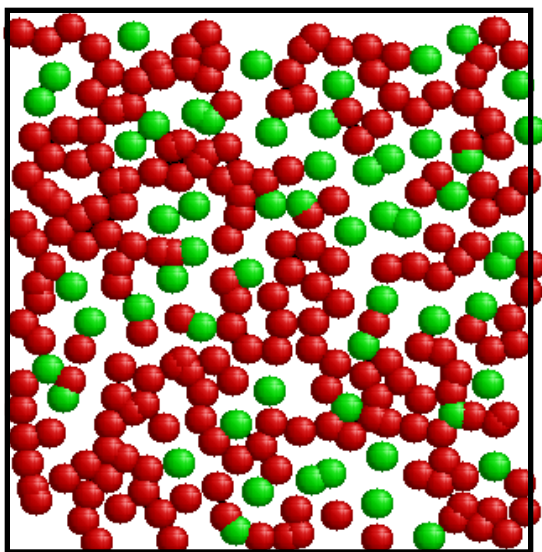
A 'HCN Világ' elmélete

Önasszociáció a felületi rétegben

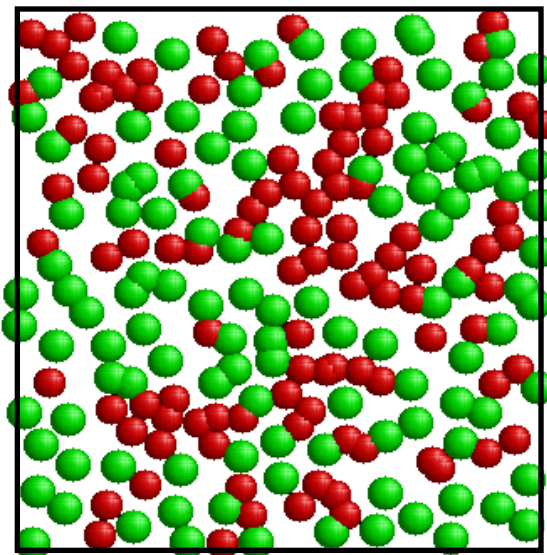
● HCN

● H₂O

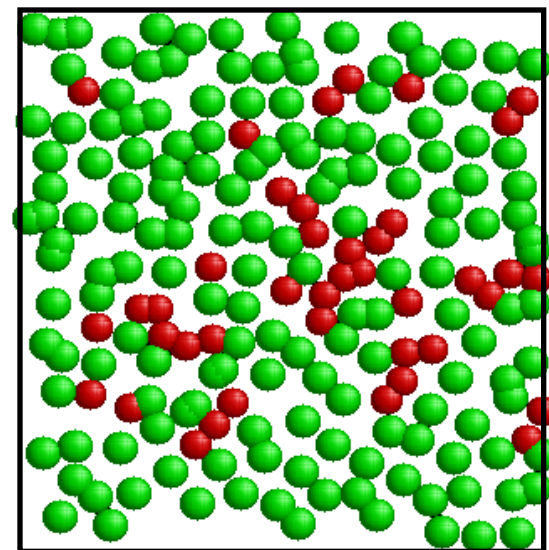
5% HCN



15% HCN



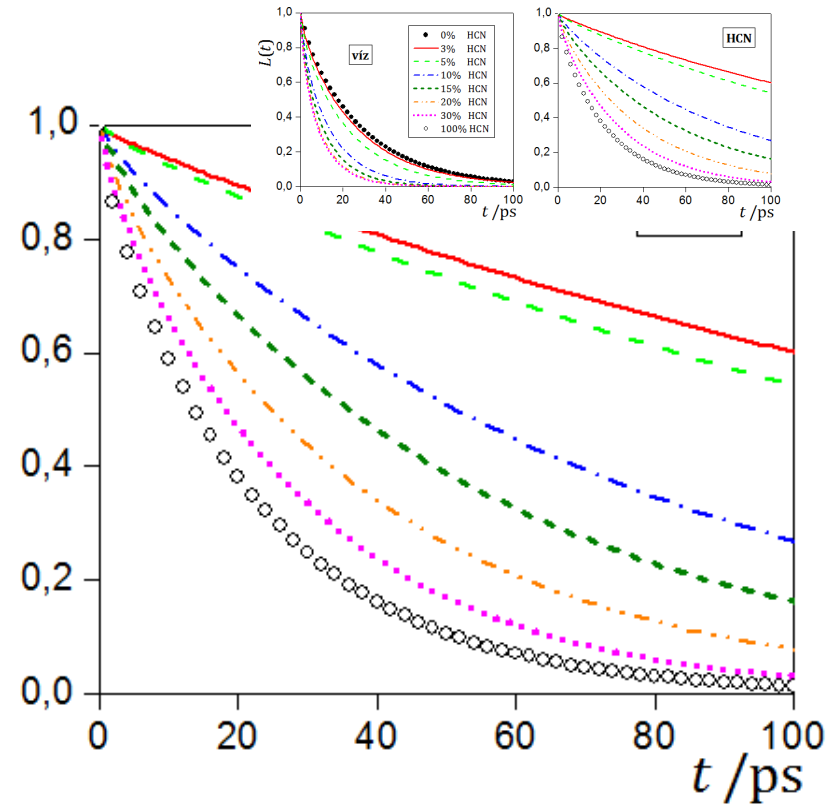
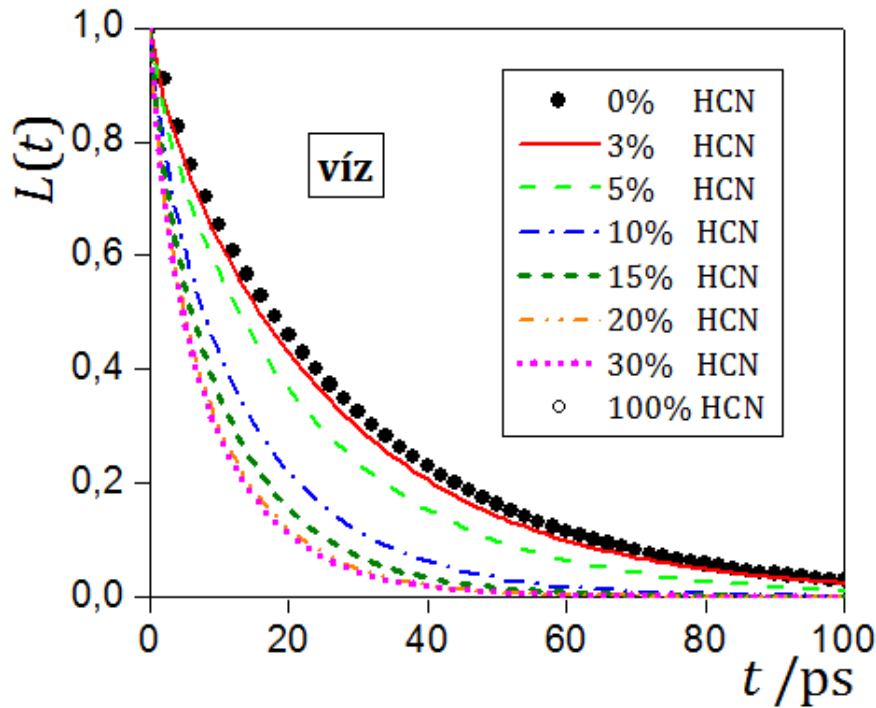
30% HCN



-a HCN molekulák a felületi rétegben belül is lokálisan feldúsulnak,
az oldat tetején "úszó szigeteket" alkotnak

A 'HCN Világ' elmélete

A felületi tartózkodás átlagos ideje



| | | | |
|----------|-------|-------|-----|
| 15% HCN | 10.88 | 55.80 | 5.1 |
| 20% HCN | 9.23 | 39.26 | 4.3 |
| 30% HCN | 8.78 | 28.81 | 3.3 |
| 100% HCN | | 22.55 | |

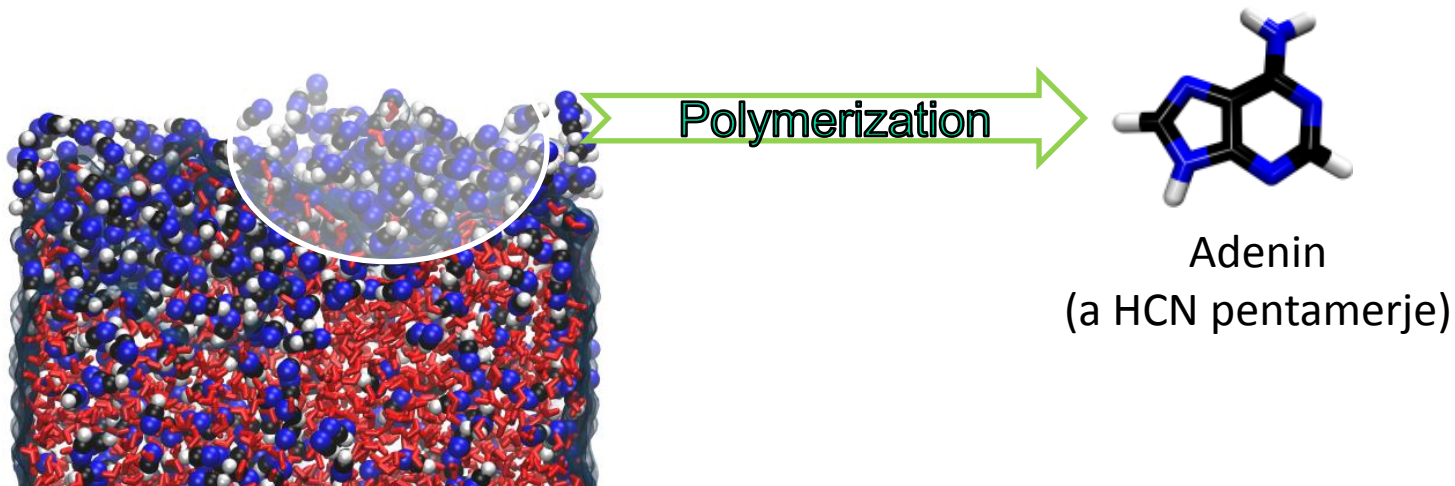
A 'HCN Világ' elmélete

Konklúziók



- a HCN molekulák jelentősen feldúsulnak vizes oldatuk felületén
- + erős önasszociációs hajlam a felületi rétegen belül
- + a HCN molekulák sokáig maradnak a felületi rétegben

Úszó HCN szigetek - az élet keletkezésének lehetséges helyszínei

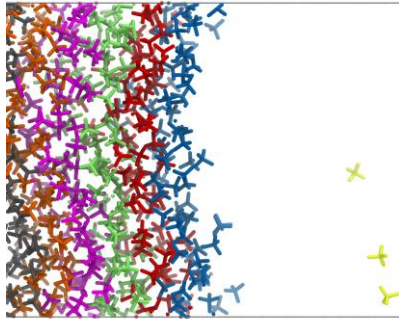


Felületi feszültség megoszlása

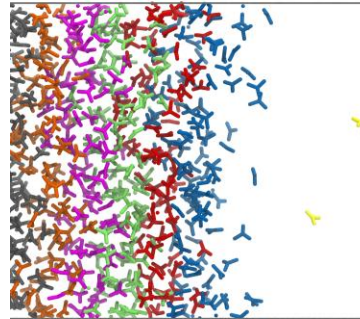
$$\gamma = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (p_N - p_L(X)) dX$$

- Normális irányú nyomáskomponens konstans (mechanikai stabilitás)
- Laterális nyomás profilja megmutatja, hogyan oszlik el a felületi feszültség a felület normálisa mentén
- Kiszámítható az is, mennyivel járulnak hozzá az egyes felület alatti rétegek a felületi feszültséghez.

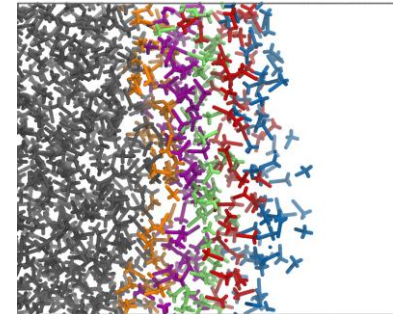
Felületi feszültség megoszlása



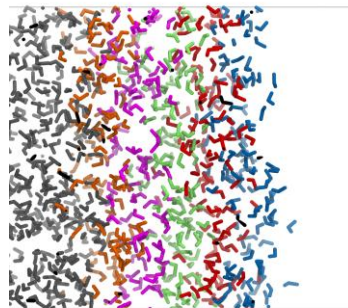
CCl_4



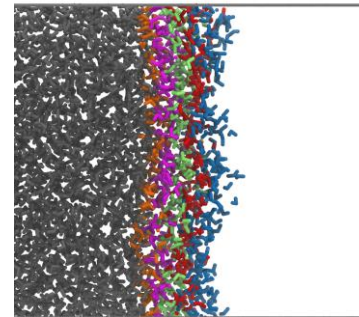
acetone



acetonitrile

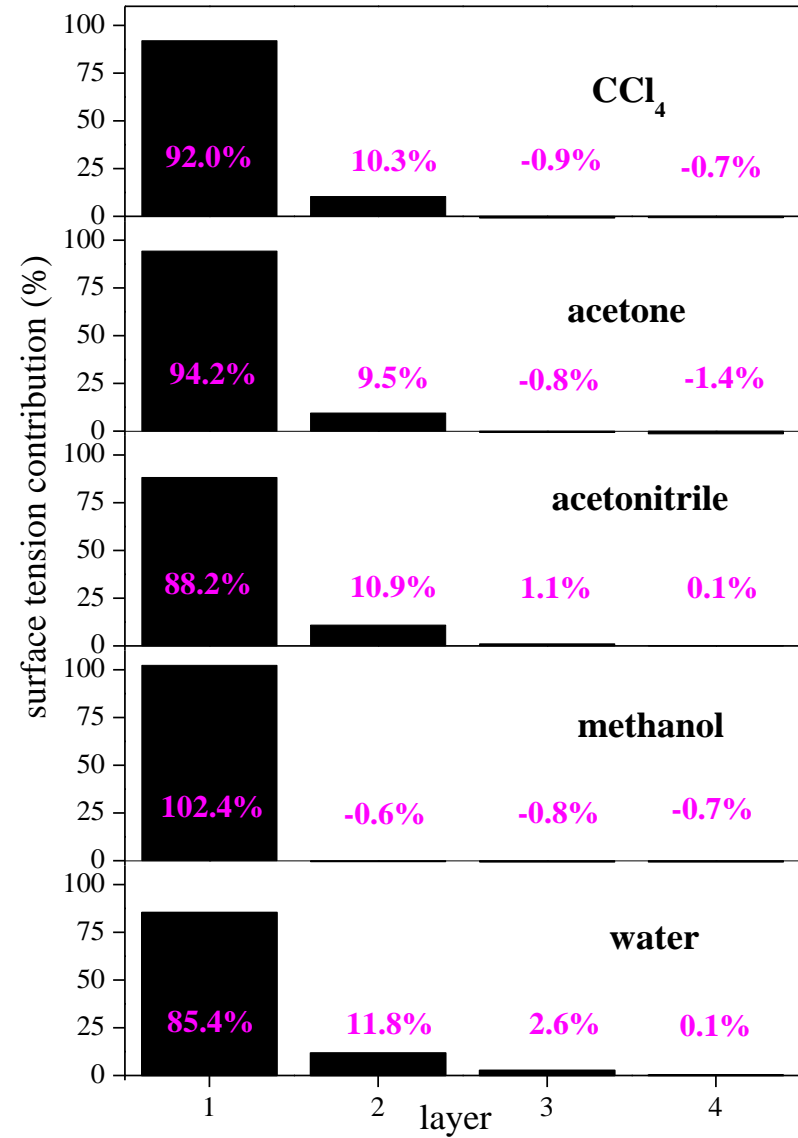
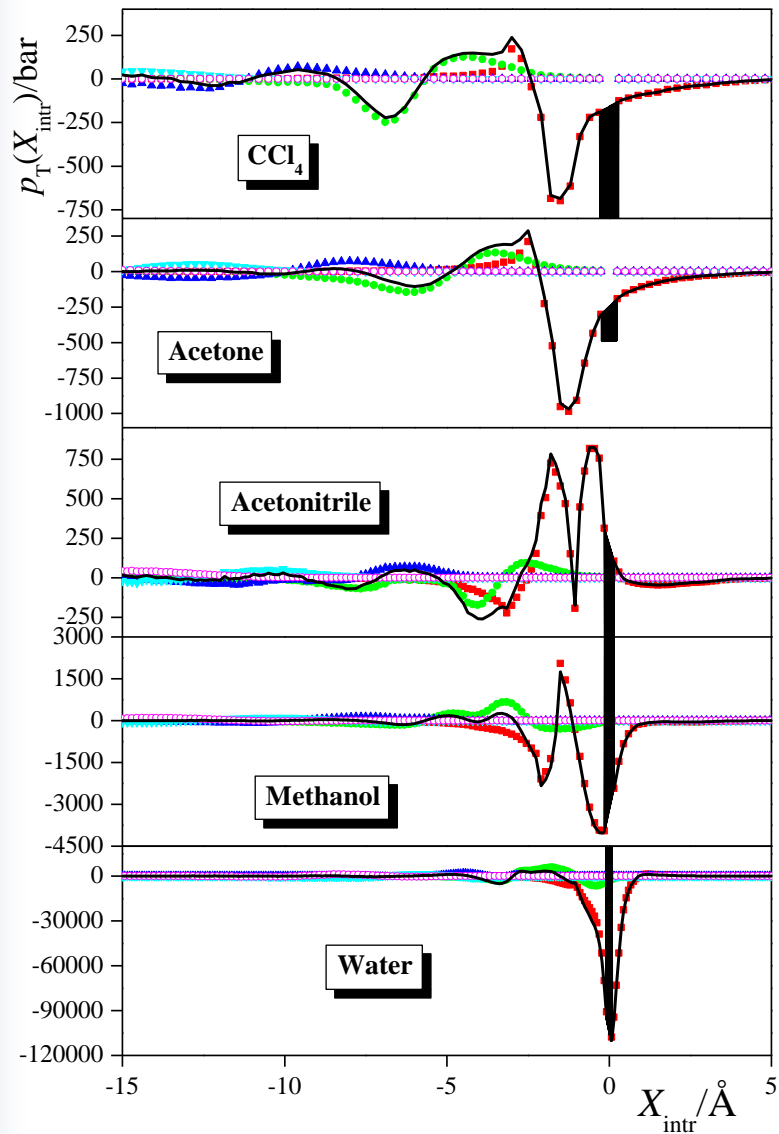


methanol



water

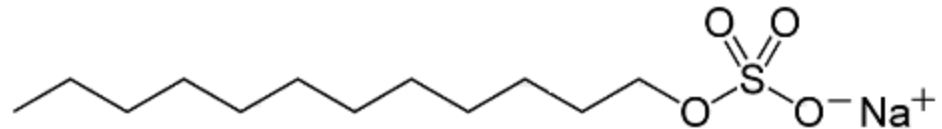
Felületi feszültség megoszlása



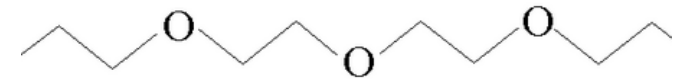
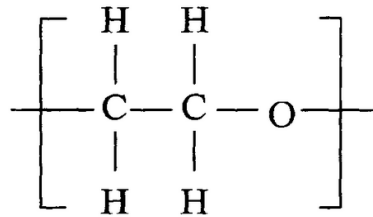
PEO megkötődése vízfelszínen

Felületaktív anyagok megkötődése víz felületén

**Nátrium dodecil szulfát
(NaDS)**



Polietilén-oxid (PEO)

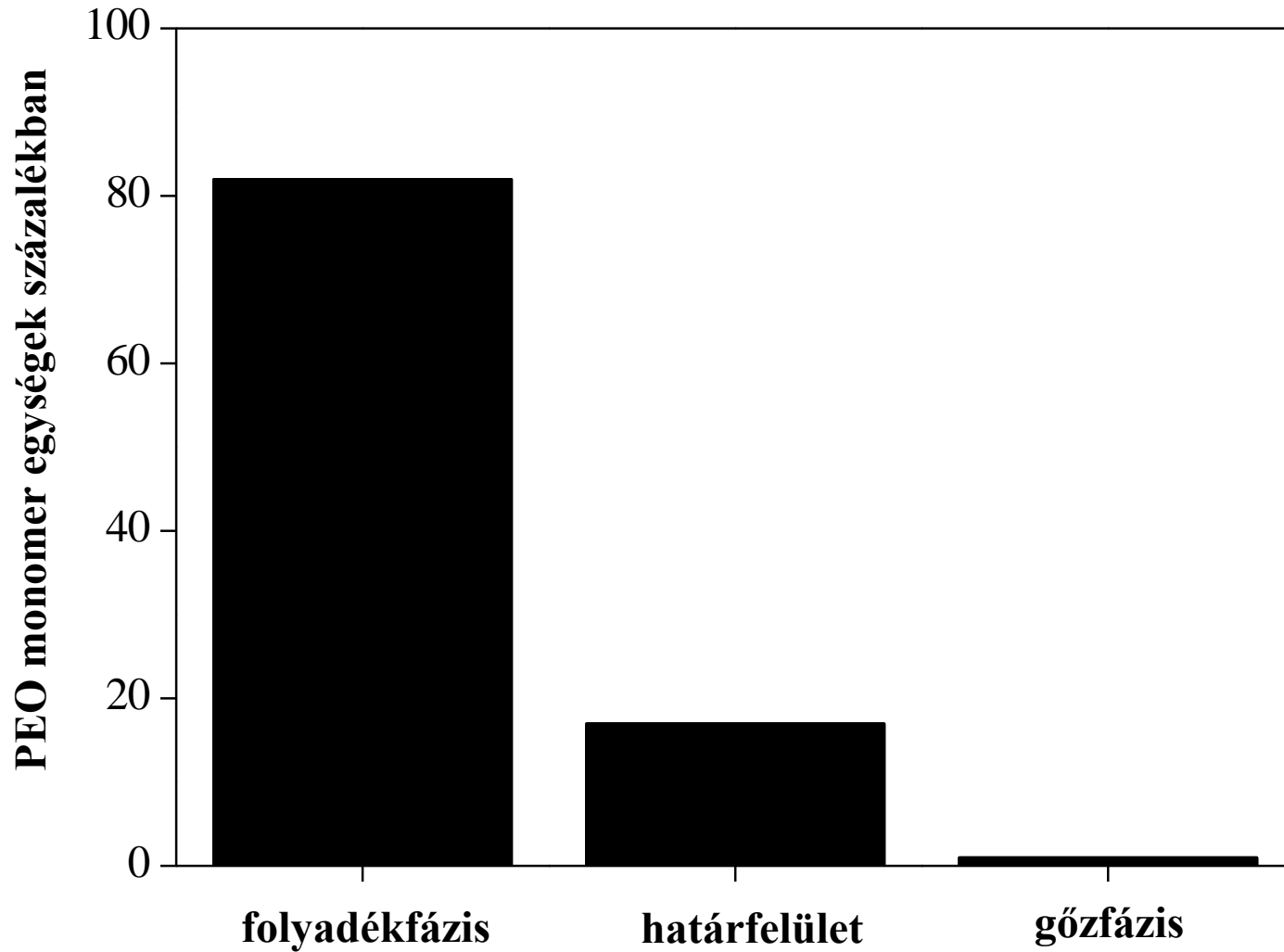


A fenti két molekula közül a NaDS kötődik erősebben a víz felületén, képes onnan a PEO-t leszorítani

Kérdés: hogyan kötődik meg a víz felületén a PEO,
és hogyan szorítja le onnan a NaDS

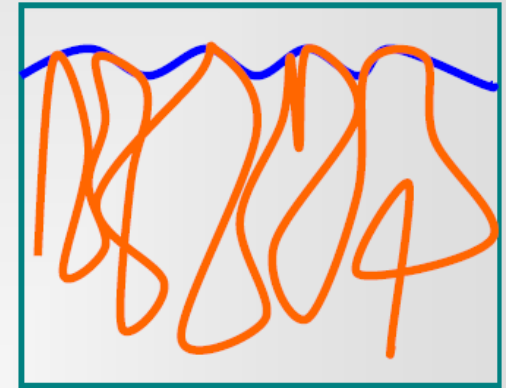
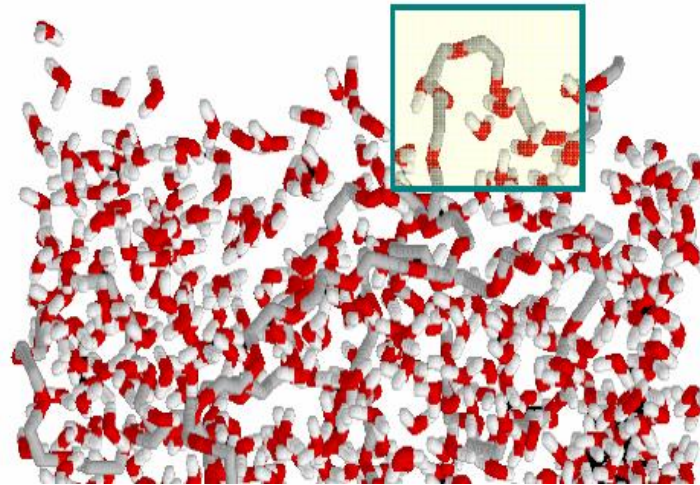
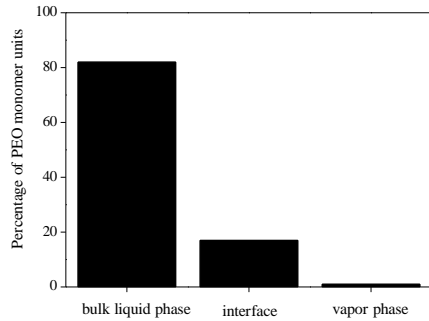
PEO megkötődése vízfelszínen

(a) ha a felületen csak PEO van



PEO megkötődése vízfelszínen

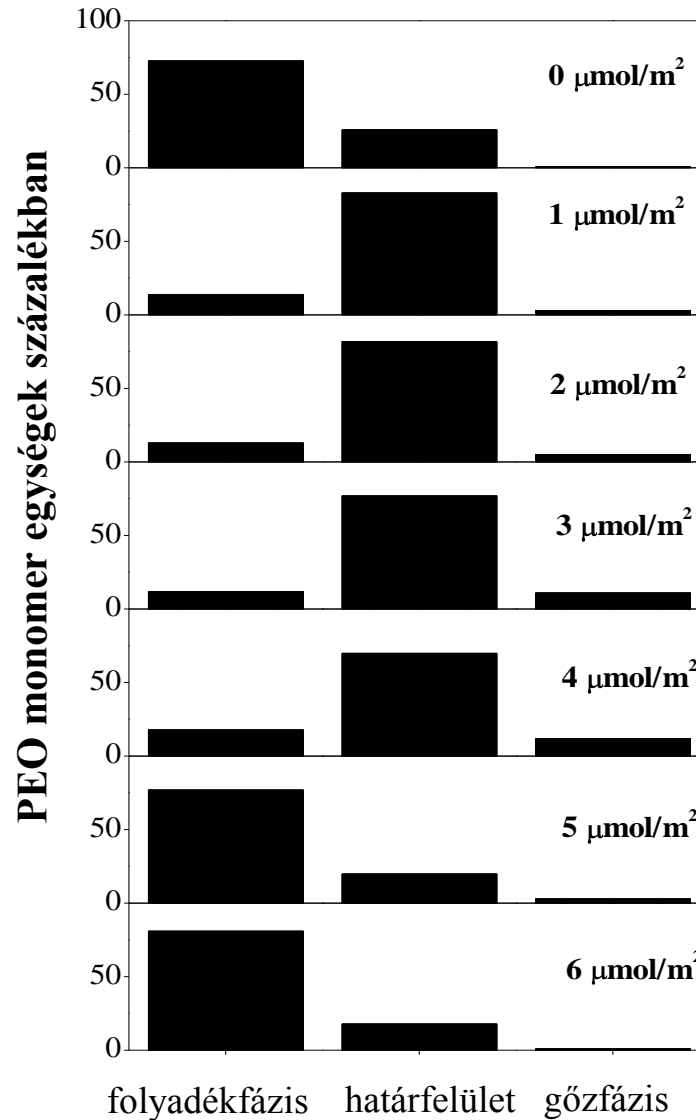
(a) ha a felületen csak PEO van



- a PEO lánc nem a felületen fekszik, csak néhány monomer egység “horgonyzik le” a felületen, a lánc többi része “belóg” a folyadékfázisba
- rövid hurkok a gőzfázisba is belógnak

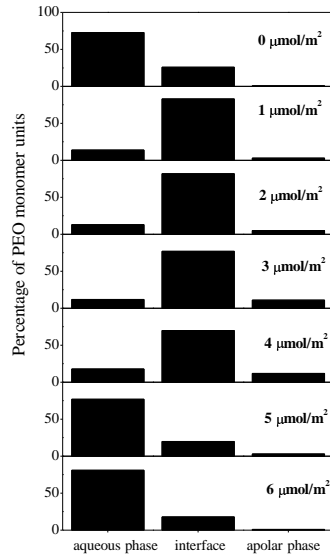
PEO megkötődése vízfelszínen

(b) ha a felületen PEO és NaDS is van

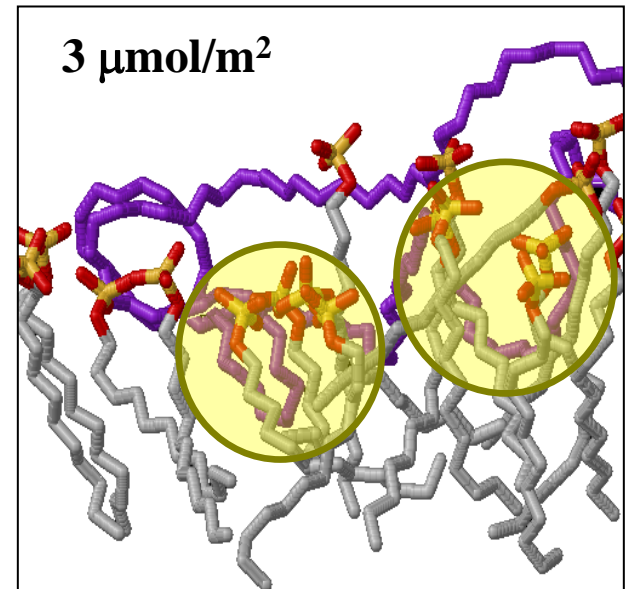
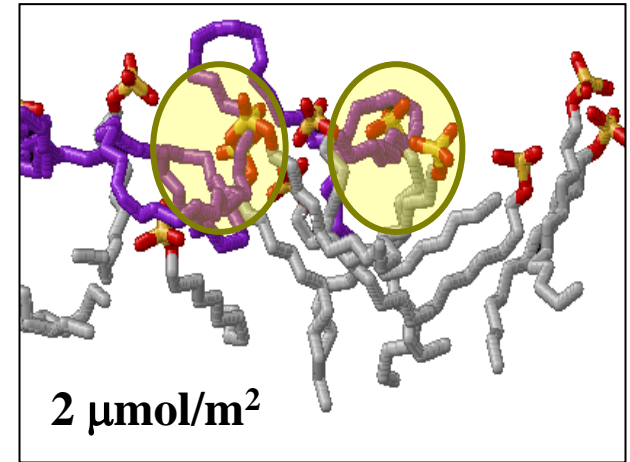


PEO megkötődése vízfelszínen

(b) ha a felületen PEO és NaDS is van

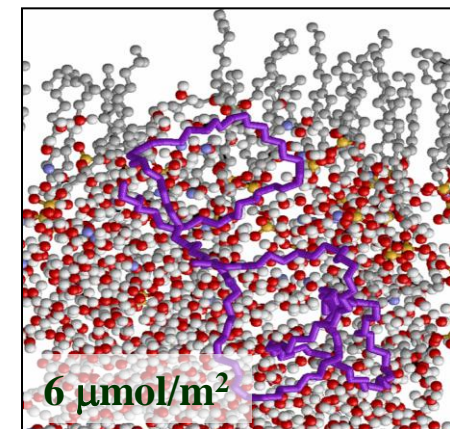
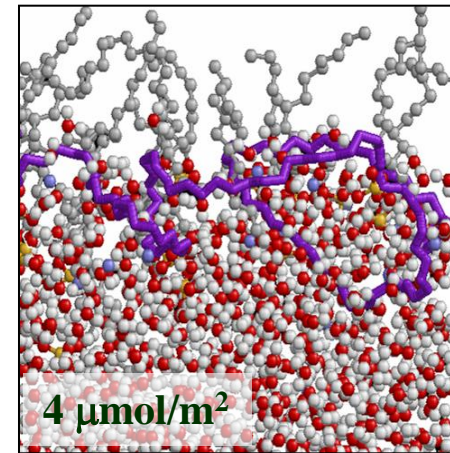
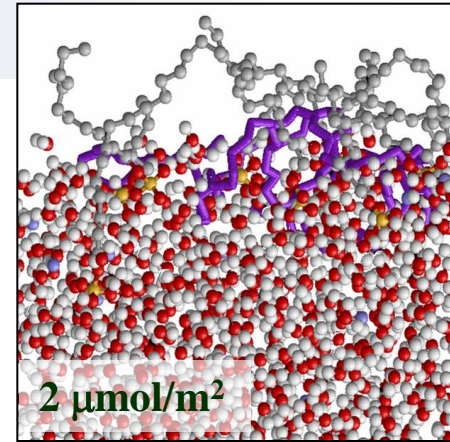
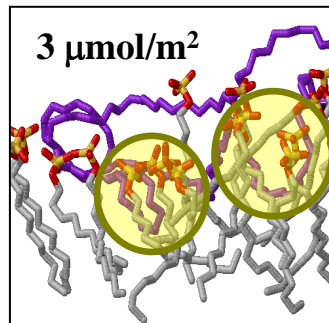
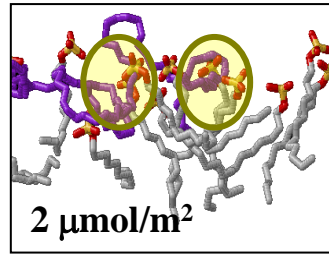
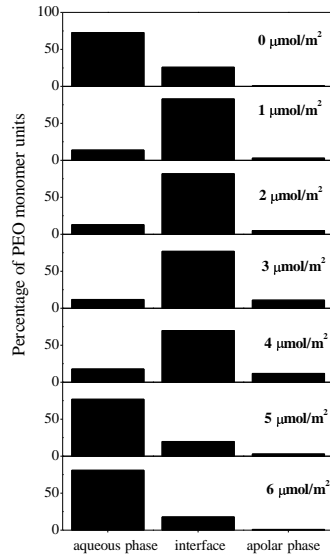


- kis mennyiségű NaDS “odavonzza” a felületre a PEO láncokat, velük micella-szerű komplexeket alkot (az apoláros molekularészeket a víz felől körülveszik a poláros csoportok)



PEO megkötődése vízfelszínen

(b) ha a felületen PEO és NaDS is van



- kis mennyiségű NaDS “odavonzza” a felületre a PEO láncokat, velük micella-szerű komplexeket alkot (az apoláros molekularészeket a víz felől körülveszik a poláros csoportok)
- nagy mennyiségű NaDS már nem fér el a felületen a PEO láncok mellett, ezért leszorítja, “belöki a vízbe” azokat

Köszönöm a figyelmüket!