

Quo vadis obliczeniowa fizyka miękkiej materii (nie)ożywionej?

A. Gadomski, N. Kruszewska, P. Beldowski, J. Siódmiak

*Zakład Fizyki, Instytut Matematyki i Fizyki,
Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej,
Politechnika Bydgoska, Al. Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz
e-mail: agad@pbs.edu.pl*

Na pograniczu fizyki fazy skondensowanej z elementami fizyki i termodynamiki statystycznej (klasycznej, a rzadziej – kwantowej) rozwija się coraz prężniej subdyscyplina fizyki, którą można określić za pomocą jednego, nieco przydługiego wyrażenia: obliczeniowa fizyka miękkiej materii (nie)ożywionej, w skrócie - OFMMnO.

Do jej zadań należy umiejętność zaproponowania adekwatnych modeli fizycznych oraz numerycznych metod symulacyjno-obliczeniowych do rozwiązywania zagadnień, które odnoszą się wprost do znanego związku (bio)materiałowego typu struktura-własność i funkcja ozn. SWiF, znanego głównie w fizyce (bio)materiałów.

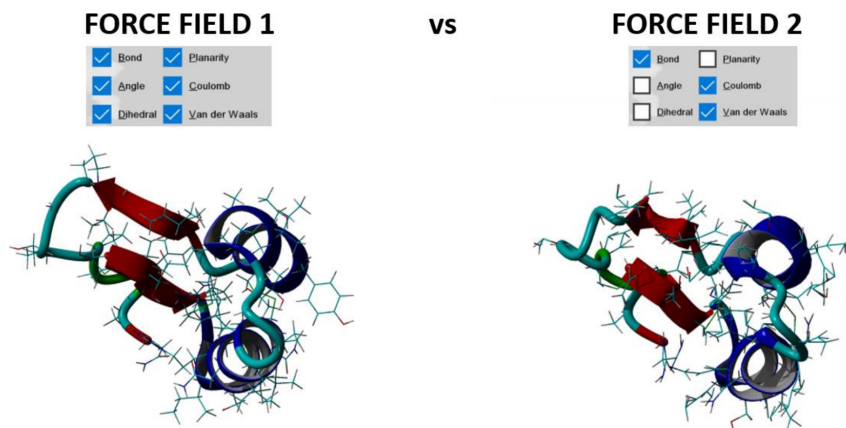
Jeśli chodzi o strukturę (S), to np. ostatnio ważne stało się zagadnienie używania porządku nematycznego do modelowania płynięcia komórek w jednowarstwach z włączonym aktywnym polem siłowym o naturze stochastyczno-lepkosprężystej.

Gdy odnieść rozważania do cechy typu własność (W), to w aktywnych układach lepkosprężystych typu tkanki dominują informacje o anomalnej dyfuzji i relaksacji (bio)materii.

Gdy z kolei przyjrzymy się bliżej takiej cesze, jak funkcja (F) układu biofizycznego lub biologicznego, to możemy, np. zauważyć opis samo-deformacyjnej aktywności komórek w tkance [1], jej chemo-mechanicznej deformacji w celu choćby transportowania „zużytych” komórek lub złogów neurodegeneracyjnych (w kierunku stanu natywnego białek), istotnych z punktu widzenia cukrzycy typu II, chorób Alzheimera, Parkinsona bądź prionowej. Zbierając więc ostatecznie informacje pochodzące z obszarów S+W+F i odnosząc je w formie wykonawczej do podstawowych zadań OFMMnO, należy wymienić następujące problemy lub zagadnienia koncepcyjno-techniczne:

- Wielkość kroku czasowego w symulacjach komputerowych MD w kontekście badanej pełnej domeny czasowej; wielkość pudła symulacyjnego oraz przyjmowane warunki początkowo-brzegowe,
- Decyzja o przyjętym w modelowaniu potencjale fizycznym/termodynamicznym oraz o typie termo- i/lub barostatu [2],
- Inkluzja wszechobecnej w materii ożywionej, ale i tej nieożywionej, wody [3] – jakim modelem się posłużyć? Itd., itp..

Podsumowując, podstawowa strategia rozwiązywania zagadnień tkwi w uniknięciu życzeniowości otrzymywanych w ramach OFMMnO wyników, a zbliżeniu się możliwie maksymalnie do zgodności z danymi eksperymentalnymi i do wynikającej z tego zbliżenia rzetelności odpowiedzi na zadawane przez eksperymentatorów pytania, często o głębokiej naturze fizycznej.



Rysunek 1: Przykładowa struktura białka, gdy (nie)włączać poszczególne człony potencjału intramolekularnego za pomocą dedykowanego software'u YASARA

Podziękowania

Badania zostały sfinansowane ze środków BN-WTiCh-11/2022.

Bibliografia

- [1] Zhang G., Yeomans J. M., Phys. Rev. Lett. 130, 038202 (2023).
- [2] Siódmiak J. *et al.*, Molecules 22, 1436 (2017).
- [3] Gadomski A. (ed.), Water in biomechanical and related systems, Springer, Cham (2021).