

# Simulacije kot orodje za razvoj naprednih funkcionalnih materialov

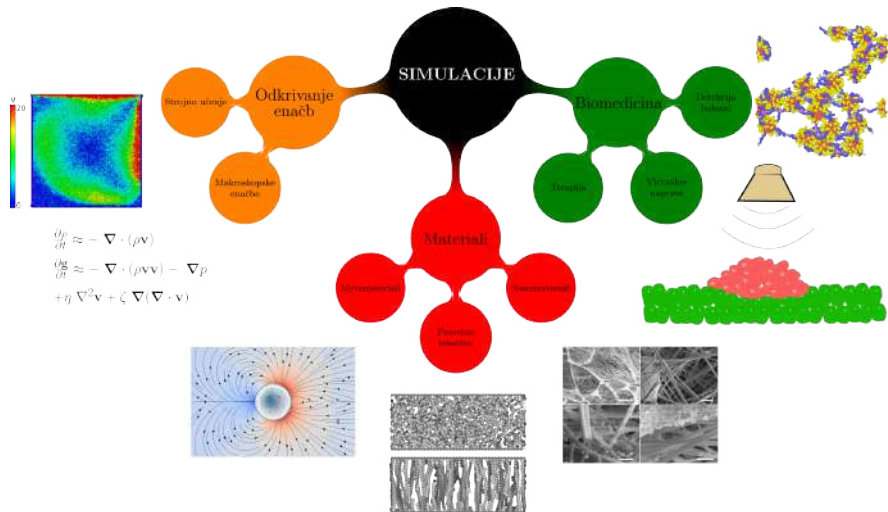
Noč ima svojo moč 2023



T. Potisk

# Simulacije

## Izbrani primeri



## Razvoj naprednih materialov:

- nanomateriali: nanodelci, nanocevkke, ...
- pametne tekočine: tekoči kristali, magnetoreološke tekočine, ferrofluidi
- metamateriali

## ... **z uporabo numeričnih metod:**

- Molekularna dinamika (MD)
- Mezoskopske metode
- Makroskopska dinamika

... **brez izvajanja dragih in dolgotrajnih eksperimentov.**

**Katero opremo potrebujemo za simulacije?**

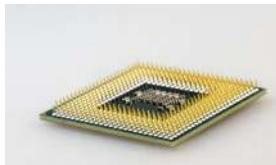
# Simulacije

## Oprema



Superračunalniki/računalniške gruč

- HPC Vega, HPC Maister (preko 100.000 jeder), HPC Trdina
- 10 petaFLOPs (1 petaFLOP =  $10^{15}$  operacij na sekundo)



Procesorji (CPU)

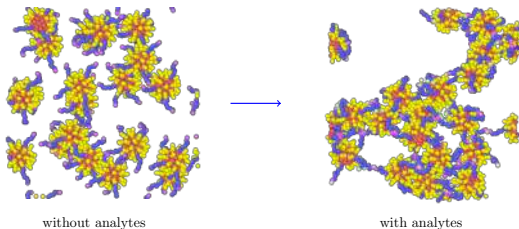


Grafične kartice (GPU)

# Izbrani primeri

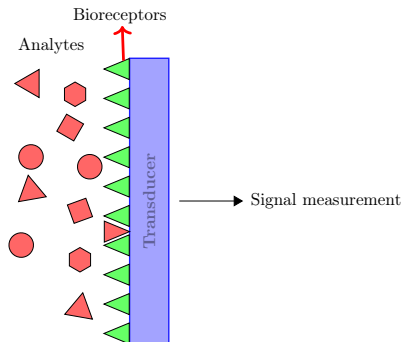
1 Funkcionalizirani nanodelci  $\rightarrow$  biosenzorji

2 Učinkovitost filtrov z nanovlakni

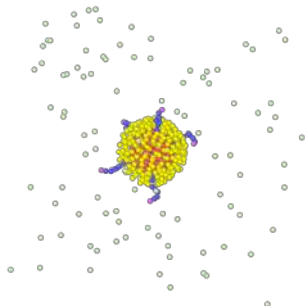


# Funkcionalizirani nanodelci → biosenzorji

- Detekcija bolezni



Delovanje biosenzorja



Nanodelec kot biosenzor

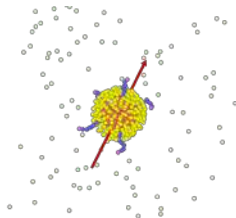


# Magnetni nanodelci: osnovna ideja

- **Biosenzorji** na podlagi magnetnih nanodelcev



imunomagnetni test



- **Ideja:** magnetni odziv skupka delcev je drugačen od homogene suspenzije

**Kako spodbuditi nastajanje skupkov nanodelcev?**



- **Funkcionalizacija površine** nanodelcev s **protitelesi** za točno določen biomarker.

**Kako simulirati tak sistem?**

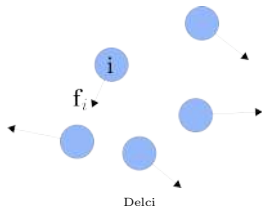
# Simulacije

## Molekularna dinamika (MD)

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$
$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{f}_i$$



Isaac Newton 1643-1727



- $\mathbf{v}_i$  - hitrost,  $\mathbf{r}_i$  - položaj,  $\mathbf{f}_i$  - sila na  $i$ -ti delec,  $m_i$  - masa
- Rešitve so **trajektorije**:  $(\mathbf{r}_i(t), \mathbf{v}_i(t))$ .
- Analiza sistema → **statistična fizika**.

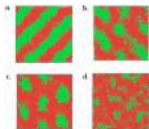
# Grobozrnenje

## Približek

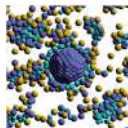
- **Ideja:** grobozrnenje številnih molekul v en delec.



- Uporabno za simulacije: mehke snovi, polimerov, koloidov, ...



X. Li *et al.*, *J. Chem. Phys.* **130**, 074908 (2009).

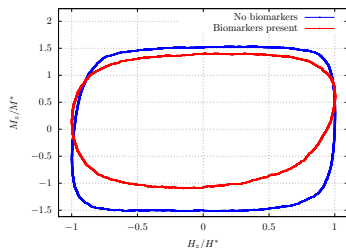
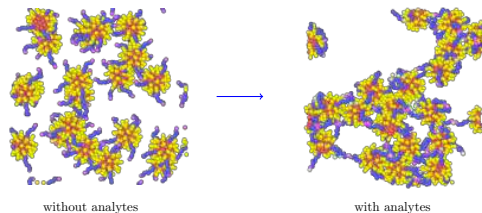


Y. Kobayashi and N. Arai, *RSC Adv.* **8**, 18568 (2018).

# Bio-funkcionalizirani nanodelci

## Dinamične vezi

- Vez se ustvari, če biomarker in protitelo prideta dovolj blizu skupaj
- **Multivalentni** biomarkerji  $\rightarrow$  gručice delcev

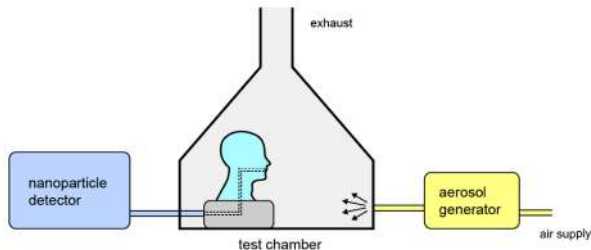


# Izbrani primeri

- 1 Funkcionalizirani nanodelci  $\rightarrow$  biosenzorji
- 2 Učinkovitost filtrov z nanovlakni



# Učinkovitost filtrov (mask)



Merjenje učinkovitosti<sup>1</sup>.



Lutka<sup>2</sup>.

- Premeri vlaken  $\gtrsim 1 \mu\text{m}$ .
- Dodamo tanko plast nanovlaken PVDF-HFP (premer do  $\sim 100 \text{ nm}$ )

<sup>2</sup>Pogačnik Krajnc, A. et al., M. Size- and Time-Dependent Particle Removal Efficiency of Face Masks and Improvised Respiratory Protection Equipment Used during the COVID-19 Pandemic. Sensors 2021, 21, 1567.

<sup>2</sup>M. Remškar and L. Pirker, privatna komunikacija.

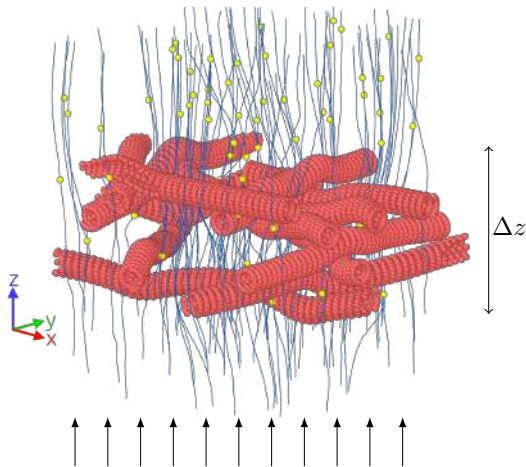




# Simulacijski model

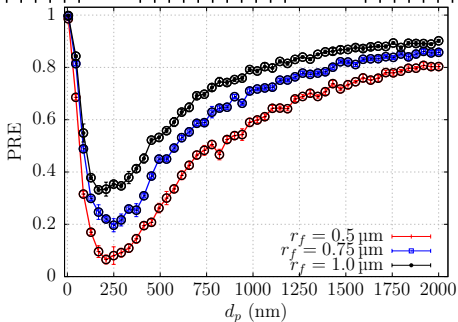
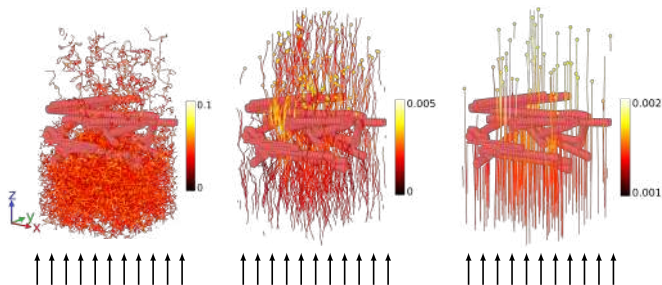
Gibanje aerosolov okoli filtracijskih vlaken

Outlet:  $p = 1$  bar



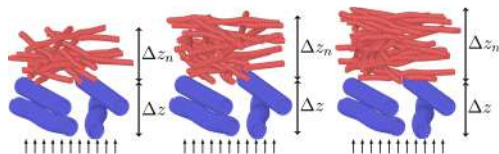
Inlet:  $q = 4 \text{ L min}^{-1}$

# Učinkovitost filtrov (mask)

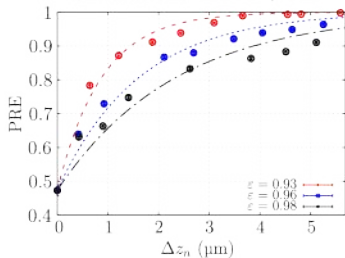


# Simulacije + eksperimenti

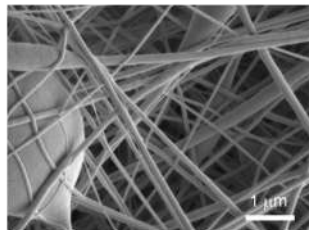
Computational model of double layer filter



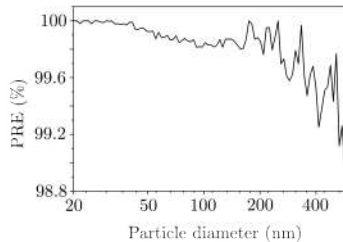
Simulations: LBM + MD



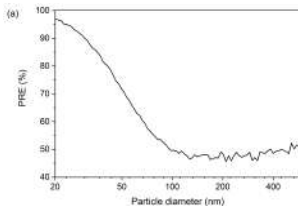
PVDF-HFP nanofibers on melamine layer



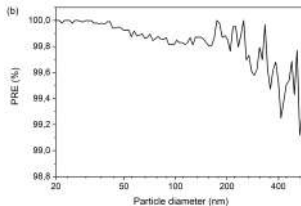
PRE measurements



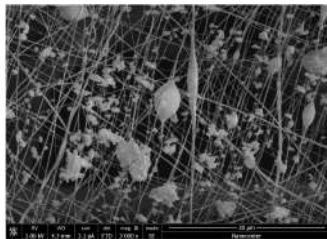
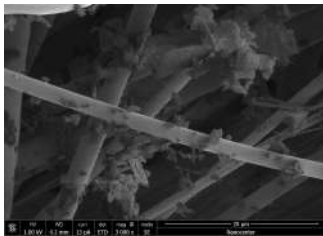
# Eksperimenti



Brez nanovlaken.



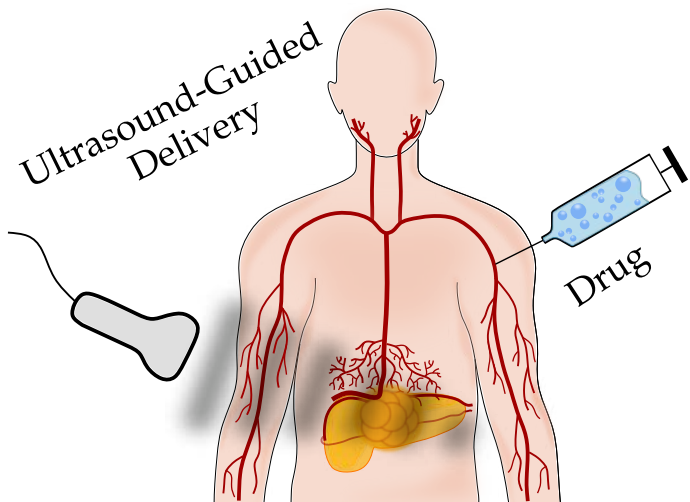
Z nanovlakni.



(levo) Melamin, (desno) nanovlakna z ujetimi delci.

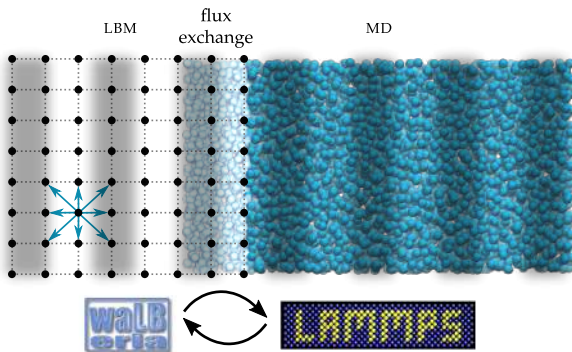
# Exaskalno računanje

- ExaFLOP =  $10^{18}$  operacij na sekundo



## Lattice-Boltzmann method - Molecular Dynamics

- ▶ **New fix style** in LAMMPS: `fix obmd` (open boundary MD)
- ▶ **Particle-flux coupling** between LAMMPS and waLBerla.

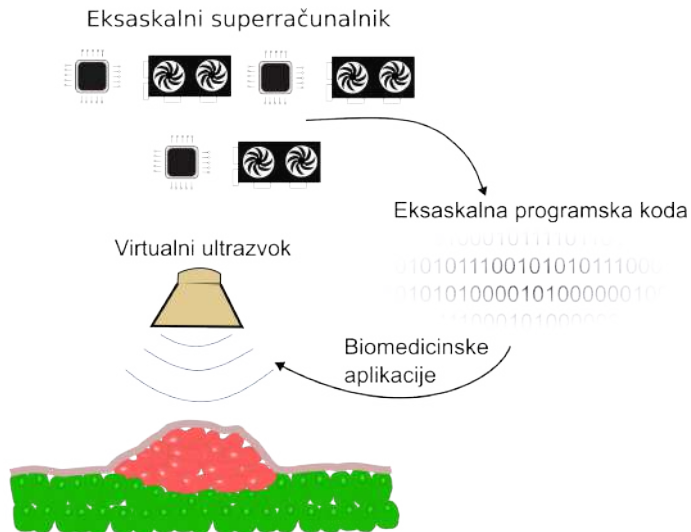


- ▶ **Applications:** Ultrasound for **biomedical applications**, **multiscale** physics, **nonequilibrium** MD, ...



# Exaskalno računanje

- ExaFLOP =  $10^{18}$  operacij na sekundo



# L17 Laboratorij za molekularno modeliranje



L17/D01

