

Szelektív iontranszport számítása póruson keresztül a Nernst-Planck egyenlethez csatolt Lokális Egyensúlyi Monte Carlo szimulációval

Kovács Róbert

Vegyészmérnök MSc. I. évfolyam

Témavezető: Dr. Boda Dezső

Kémia Intézet, Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék

Célunk az ionok transzportjának tanulmányozása póruson keresztül egy molekuláris modell alapján. Az általunk tanulmányozott rendszer egy biológiai példa: egy modell-kalciumcsatorna szelektivitását vizsgáljuk. Kiszámítjuk, hogy különböző összetételű NaCl-CaCl₂ elegyből mennyi Na⁺ illetve Ca²⁺ ion halad át a csatornán.

Feltesszük, hogy a transzport diffúzió és hogy azt a Nernst-Planck-egyenlet (NP) írja le. Az egyenlet megoldásához szükségünk van a koncentráció és az elektrokémiai potenciál között egy összefüggésre, amit jelen esetben a Lokális Egyensúlyi Monte Carlo (LEMC) szolgáltat számunkra (NP+LEMC módszer). Az NP+LEMC rendszerben iteratív módon kapjuk a megoldást, ahol az iteráció alapját az képezi, hogy a kontinuitási egyenletnek (az anyagmegmaradásnak) teljesülnie kell.

Eredményeink rávilágítanak arra, hogy a kalciumcsatorna szelektivitása (a Ca²⁺ és Na⁺ ionok fluxusainak aránya) egyszerre függ attól, hogy a különböző ionok milyen valószínűséggel adszorbeálódnak a pórusba, illetve hogy melyik mennyire mozgékony a csatornában. Eredményeinket Dinamikai Monte Carlo adatokkal hasonlítjuk össze.