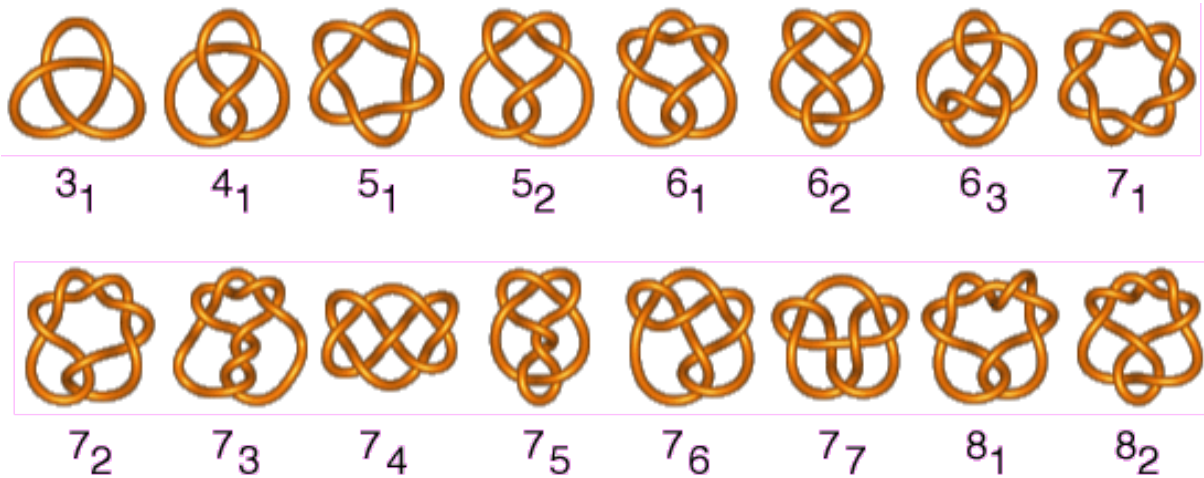


Übersicht

- Molekulardynamik-Simulation (espresso) eines Polymers mit Knoten, an dessen Enden gezogen wird
- Ziel: Knotenverhalten herausfinden

Knoten

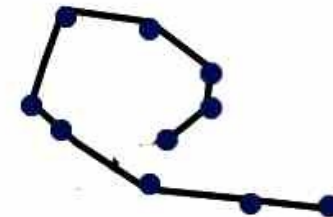
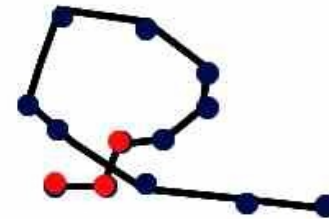
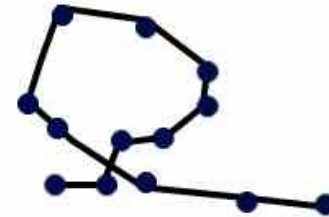
**Lord Kelvin (1867):
“Vortex Atome”**



Knotenfindung durch Alexanderpolynom

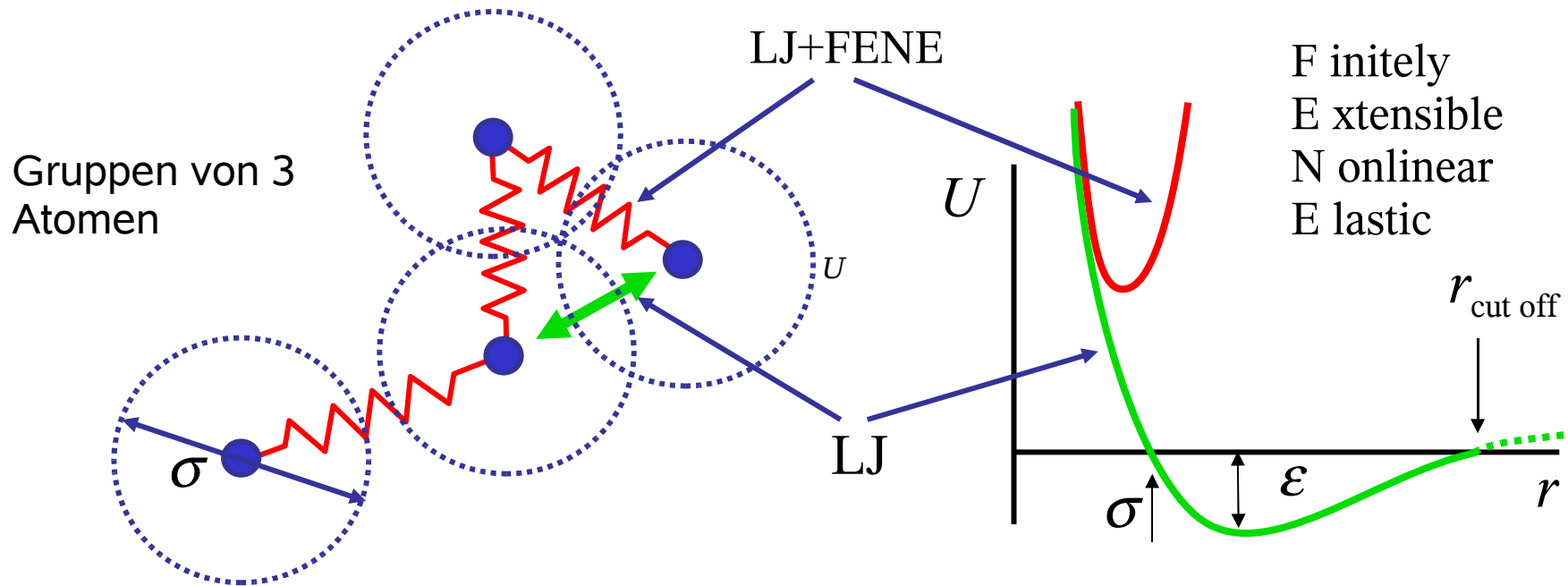
Knotengrößen

- Enden im Unendlichen verbunden
- Das äußerste Atom einer Seite wird entfernt, bis AP Unknoten meldet
- Wdh für andere Seite
- den Kram mündlich



Art der Simulation

Vergrößerte Polymermodelle (Kugel-Feder Modell)



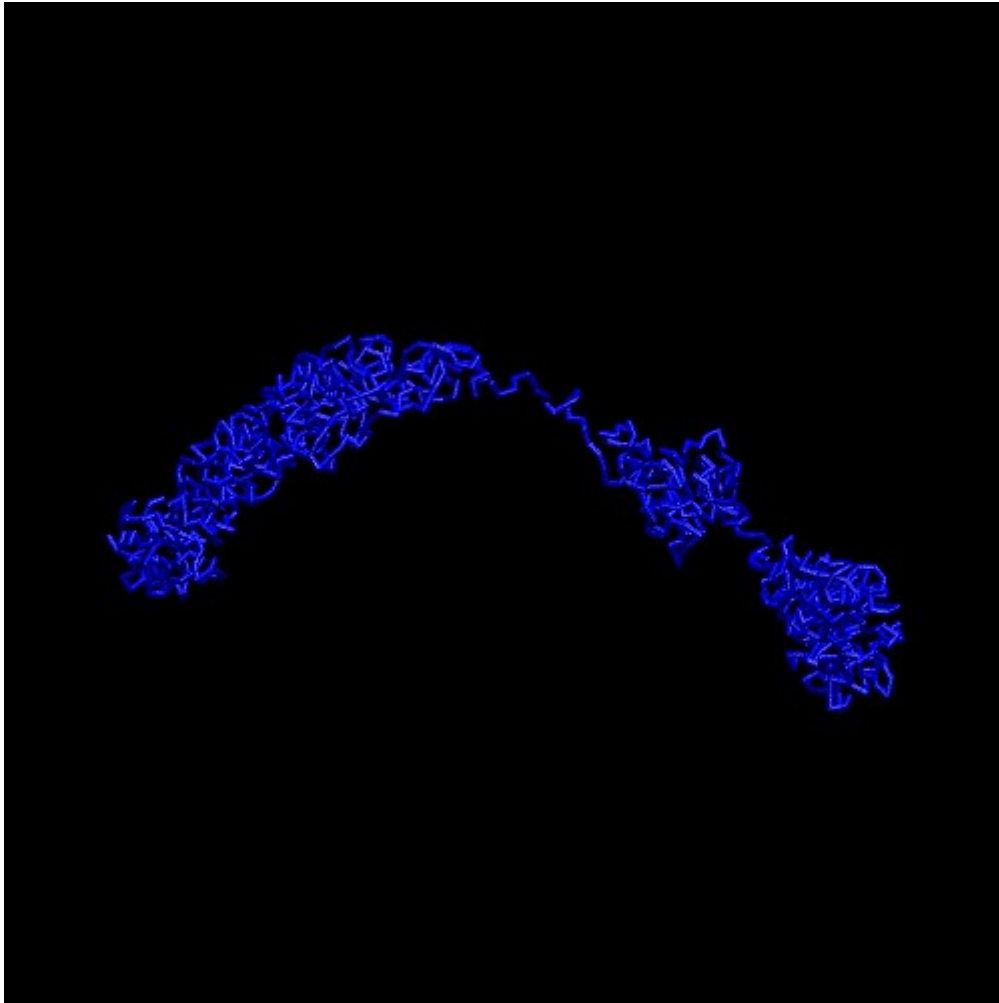
$$U_{LJ}(r) = 4\epsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 + \Delta U_{cut\ off}$$

$$U_{FENE}(r) = -33.75 \ln \left(1 - \left(\frac{r}{1.5\sigma} \right)^2 \right)$$

Polymere

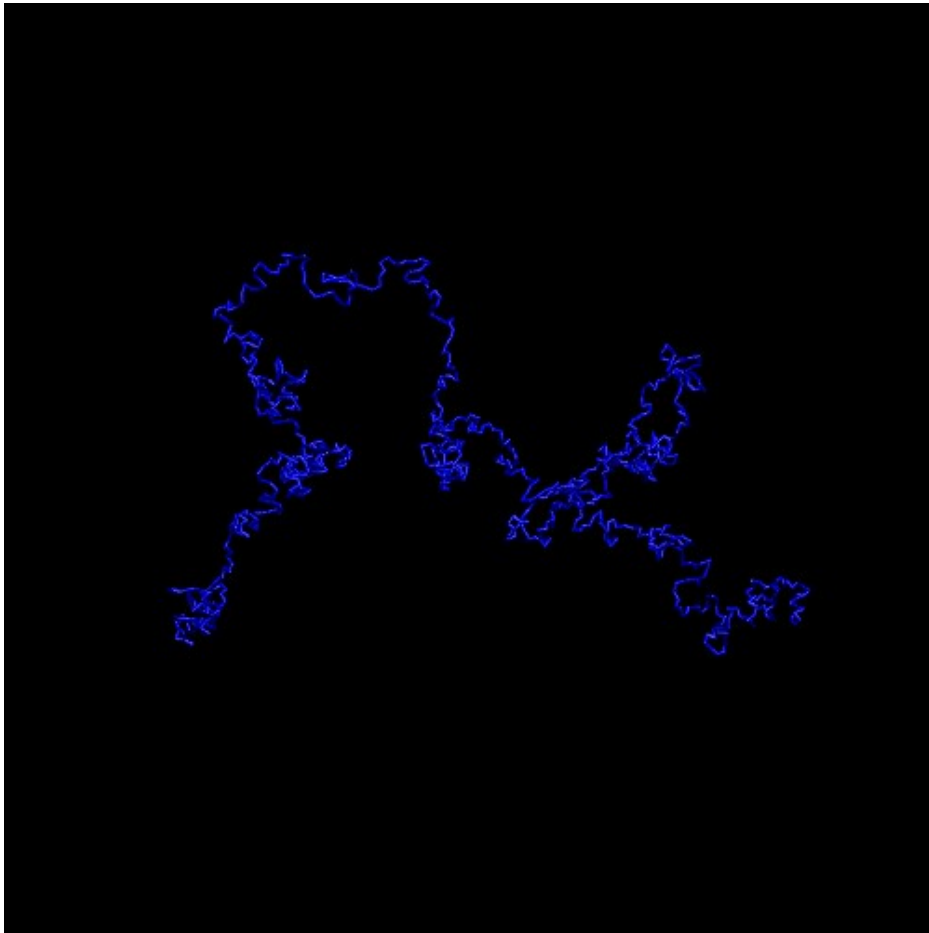
- Lange Atomketten
- Freie Energie bestimmt Konfiguration
- $F=TS+H$
- Enthalpie steigt mit Bindungsenergie
- Entropie: steigt mit Freiheitsgraden in der Konfiguration

Tiefe Temperaturen



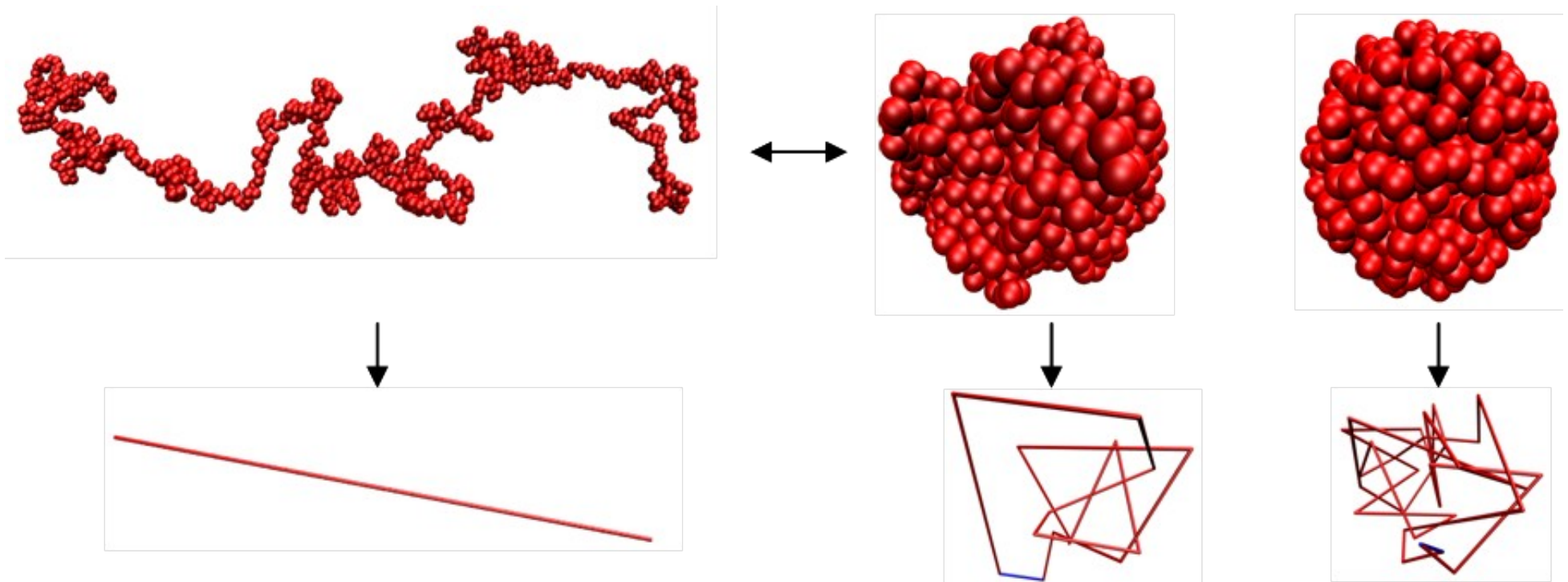
- H überwiegt
- Globulärer Zustand
- große Schwierigkeiten bei Knotenbestimmung

Hohe Temperaturen



- TS überwiegt
- Protein denaturiert
- große
Bewegungsfreiheit in
den Enden

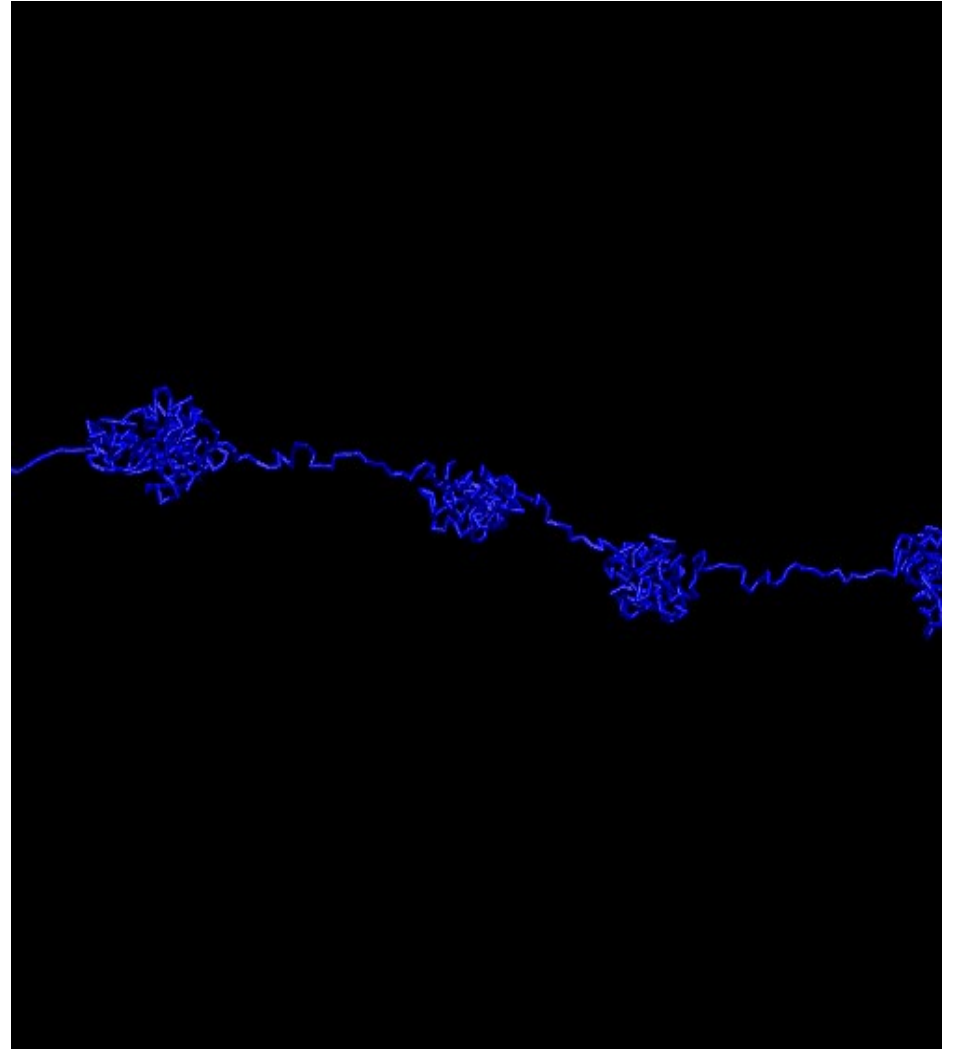
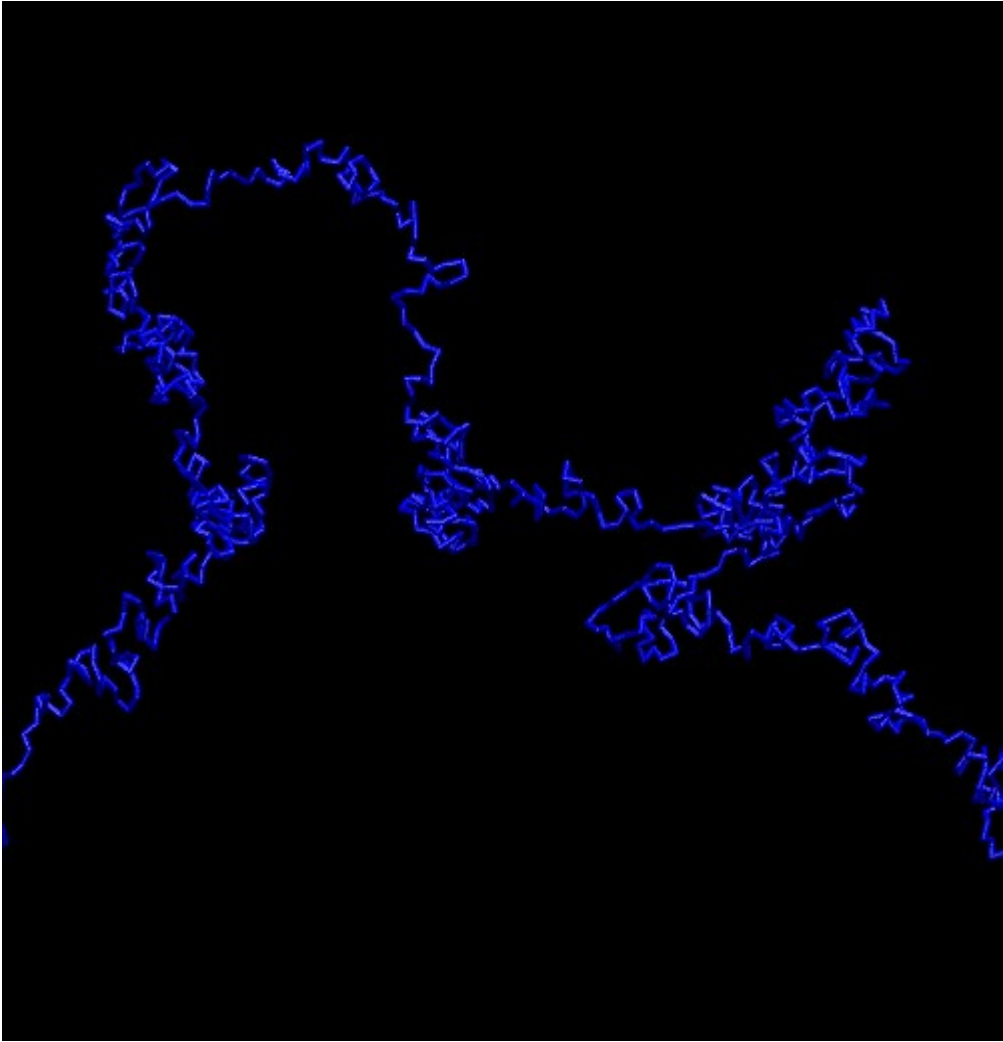
Knoten in Polymeren (Simulation)



selten ($N=1000$, 1%)
in Lösung: dazwischen (5-10%)

häufig ($N=1000$, 80%)

Knoten bei niedriger Temp



Knoten bei hoher Temperatur

