

# Projecte de Treball Fi de Màster (TFM)

Màster en Modelització Computacional  
Atomística i Multiescala en Física,  
Química i Bioquímica  
UB/UPC

<b>Títol</b>	<b><i>La influència de l'estirament mecànic en les propietats conformacionals i d'ionització d'un polielelectròlit feble: poli(etilenimina) lineal com a cas de model.</i></b>
<b>Title</b>	<b>The influence of mechanical stretching on the conformational and ionization properties of weak polyelectrolyte: linear poly(ethylenimine) as model case</b>

<b>Director</b>	<b>Sergio Madurga/Pablo M. Blanco</b>
<b>Departament</b>	<b>Ciència de Materials i Química Física</b>
<b>Universitat</b>	<b>Universitat de Barcelona</b>
<b>Tutor<sup>1</sup></b>	

**Curs** 2023-24

## Summary<sup>2</sup>

This project aims to investigate the mechanical response of weak polyelectrolytes, focusing on understanding the intricate interplay between charge regulation and mechanical stretching. In particular, the study will use linear poly(ethylenimine) (LPEI) as a model case to unravel its conformational and ionization properties under mechanical stretching. The primary objective is to build a coarse-grained model of LPEI and study its mechanical response varying the polymer length and the medium conditions (ionic strength and pH). Simulations will be conducted using a combined scheme of Langevin Dynamics and Monte Carlo implemented through the ESPResSo software package. Programming tasks involve the development of Python scripts for including specific interactions, like hydrogen bonds, into the Monte Carlo methods supported in ESPResSo. Various properties of the system, such as the radius of gyration, the degree of ionization and the radial distribution function, will be calculated to comprehensively analyze and compare different systems.

**Keywords<sup>3</sup>** Weak Polyelectrolytes, Charge Regulation, Mechanical Stretching, ESPResSo

## Breu descripció del projecte<sup>4</sup>

Aquest projecte té com a objectiu investigar la resposta mecànica dels polielelectròlits febles, amb un enfocament en comprendre la intrincada interacció entre la regulació de càrrega i l'estirament mecànic a nivell gruixut. Els polielelectròlits febles tenen la capacitat d'adaptar la seva càrrega en resposta a estímuls externs, com ara variacions en el pH, la concentració de sal o les interaccions electrostàtiques amb altres espècies carregades[1,2]. L'estudi posarà especial èmfasi a desentrellar les propietats conformacionals i d'ionització del poli(etilimina) lineal (LPEI)[3], un aspecte crític per a aplicacions en l'envàs de medicaments, la transfecció gènica i la ciència dels materials.

El focus principal consistirà en construir un model específic per als polielelectròlits febles lineals. L'estudiant adquirirà habilitats en la modelització i simulació de polímers individuals en diverses solucions aquoses. Es incorporaran diferents longituds de polímers, forces iòniques i valors de pH a les simulacions.

La dinàmica de Langevin, implementada mitjançant el versàtil paquet de programari ESPResSo[4,5], s'aplicarà a les simulacions. Diverses condicions de simulació s'analitzaran per entendre el procés de direcció de diferents polímers lineals febles en funció del pH. L'aspecte de programació del projecte implicarà el desenvolupament de scripts en Python per especificar interaccions, com ara enllaços d'hidrogen, dins les simulacions d'ESPResSo. Es calcularan diverses propietats d'interès, com ara el radi de gir, el grau d'ionització i les funcions de distribució radial per analitzar de manera exhaustiva diferents sistemes.

Aquest estudi complet pretén aprofundir en la comprensió del comportament mecànic dels polielelectròlits febles, amb un enfocament específic en la LPEI.

[1] Blanco, P. M., Narambuena, C. F., Madurga, S., Mas, F., & Garcés, J. L. (2023). Unusual Aspects of Charge Regulation in Flexible Weak Polyelectrolytes. *Polymers*, 15, 2680.

[2] Blanco, P. M., Madurga, S., Mas, F., & Garcés, J. L. (2018). Coupling of charge regulation and conformational equilibria in linear weak polyelectrolytes: Treatment of long-range interactions via effective short-ranged and pH-dependent ... *Polymers*, 10, 811.

[3] Garcés, J. L., Madurga, S., & Borkovec, M. (2014). Coupling of conformational and ionization equilibria in linear poly(ethylenimine): A study based on the site binding/rotational isomeric state (SBRIS) model. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16, 4626-4638.

[4] Weik, F., Weeber, R., Szuttor, K., et al. (2019). ESPResSo 4.0 – an extensible software package for simulating soft matter systems. *European Physical Journal Special Topics*, 227, 1789-1816.

# Projecte de Treball Fi de Màster (TFM)

Màster en Modelització Computacional  
Atomística i Multiescala en Física,  
Química i Bioquímica  
UB/UPC

[5] Weeber, R., Grad, J.N., Beyer, D., Blanco, P. M., Kreissl, P., Reinauer, A., Tischler, I. Košov, P. & Holm C. "ESPResSo, a versatile open-source software package for simulating soft matter systems," in Comprehensive Computational Chemistry, edited by M. Yáñez and R. J. Boyd (Elsevier, Oxford, 2024) 1st ed., pp. 578-601.

<sup>1</sup>Si el director no és un professor de la UB o de la UPC, caldrà assignar un tutor del TFM que designarà la Comissió Coordinadora del Màster.

<sup>2</sup>Aquest "summary" és el que apareixerà a la futura pàgina web dedicada al TFM. Procureu que sigui concís i entenedor (màx. 10 línies).

<sup>3</sup>Aquestes "keywords" no només són les que apareixeran al web sinó que ajudaran la Comissió Coordinadora del Màster a assignar el projecte a un àrea concreta.

<sup>4</sup>Procureu ser concisos però proporcioneu prou informació per tal que l'estudiant i la Comissió Coordinadora del Màster es facin una idea prou acurada de en què consistirà el treball. **Indiqueu 3-6 publicacions de referència en la descripció del projecte per donar una idea dels fonament, metodologia, objectius, etc.**

## Competències addicionals<sup>5</sup> (opcional)

Tasca	Descripció	Cronograma (setmanes)																	
		01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16	17	18
T01	Bibliografia (aprox. 50 h)	X	X	X				X	X										
T02	Aprenentatge del programari (aprox. 75h)		X	X	X	X	X												
T03	Simulacions (aprox. 150h)						X	X	X	X	X	X	X	X	X				
T04	Anàlisi i racionalització dels resultats (aprox. 100h)									X	X	X	X	X					
T05	Redacció de la memòria i preparar l'exposició (aprox. 100h)														X	X	X	X	X
T07	Script protocol for experimental data treatment of force-distance curves			X	X	X	X	X	X	X									
T08																			
T09																			
T10																			

## Observacions i comentaris

Per a la realització del treball pròpiament dit es preveu una dedicació d'unes quatre hores diàries durant cinc dies a la setmana, amb la opció de modificació de l'horari per poder adaptar-se millor a l'horari acadèmic de l'estudiant.

Signatura:

Dr. Sergio Madurga  
Dept. Ciència de Materials i Química Física  
Universitat de Barcelona

Dr. Pablo M. Blanco  
Department of Physics  
Norwegian University of Science and Technology

<sup>5</sup> Enumereu breument qualsevol competència addicional a les competències genèriques enumerades en el Pla Docent del TFM (opcional).

<sup>6</sup> Feu servir només les línies que calgui. Escolliu-les de manera que donin una idea aproximada de en què consistirà el treball i la seva distribució temporal.