



Τεχνολογικό  
Πανεπιστήμιο  
Κύπρου

Σχολή Γεωτεχνικών  
Επιστημών και  
Διαχείρισης  
Περιβάλλοντος

**Πτυχιακή εργασία**

**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS FOR  
DESALINATION (AQUAPORINE MIMETICS)**

**Δήμητρα Κατεχάκη**

**Λεμεσός, Μάιος 2019**



ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ  
ΣΧΟΛΗ ΓΕΩΤΕΧΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ  
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ  
ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

Πτυχιακή εργασία

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΓΙΑ  
ΑΦΑΛΑΤΩΣΗ (ΑΝΑΛΟΓΑ ΑΚΟΥΑΠΟΡΙΝΗΣ)

της

Δήμητρα Κατεχάκη

Επιβλέπων Καθηγητής  
Δρ. Ευάγγελος Δασκαλάκης

Λεμεσός, Μάιος 2019

## **Πνευματικά δικαιώματα**

Copyright © Δήμητρα Κατεχάκη, 2019

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Η έγκριση της πτυχιακής εργασίας από το Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου δεν υποδηλώνει απαραίτητως και αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα εκ μέρους του Τμήματος.

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η περιγραφή και η ανάπτυξη μεθόδου αφαλάτωσης με την χρήση μεμβρανών, αποτελούμενες από ιμιδαζόλια, σε υπολογιστικά μοντέλα μοριακής δυναμικής.

Η μοριακή προσομοίωση αφορά την ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων και την υπολογιστική εκτέλεση τους. Ο υπολογισμός βασίστηκε στην Μοριακή Δυναμική, όπου περιεγράφηκε και μελετήθηκε η δυναμική συμπεριφορά του συστήματος αφαλάτωσης. Η προσομοίωση γίνεται με τη χρήση τεχνητών μεμβρανών και πόρων, από πολυμερή ιμιδαζολίων που αντιγράφουν την λειτουργία της ακουαπορίνης. Η ακουαπορίνη είναι μια πρωτεΐνη διάυλος που βρίσκεται στον ανθρώπινο οργανισμό, εξαιρετικά εκλεκτική, αφήνοντας τη διέλευση μόνο των νερών/ πρωτονίων και την συγκράτηση των πλείστον ιόντων.

Η μελέτη του συστήματος γίνεται σε ψηφιακό περιβάλλον όπου γίνεται ο διαχωρισμός του χλωριούχου νατρίου ( $\text{NaCl}$ ) με το καθαρό νερό. Επίσης μελετάται ο βαθμός αξιοποίησης της μεθόδου αυτής της αφαλάτωσης, καθώς και η απόδοση σε σχέση με άλλες τεχνικές.

## **ABSTRACT**

The purpose of this diploma thesis is to describe and develop a desalination method using membranes consisting of imidazoles, by employing molecular dynamics simulation.

The molecular simulation involves the development of mathematical models and their computational execution. The calculation was based on Molecular Dynamics, where the dynamic behavior of the desalination system was described and studied. The simulation method is based on the setup of a membrane and a pore made up of imidazolium polymers that replicate the aquaporin function. Aquaporins are protein channels located in the human body, highly eclectic, leaving the only water/ protons to pass through the channel and retaining most of the rest of ions.

The study of the system is carried out in a digital environment where we separate the sodium chloride (NaCl) from pure water. We also study the value of adaptation of this technique to current methods on desalination protocols, as well as its performance over other techniques.