**NUMER IDENTYFIKACYJNY // CONTRIBUTION ID**

**Szum energetyczny jako sygnatura procesów równowagi w dynamice molekularnej sieci biopolimerowej**

**Autor:** Jacek Siódmiak1,2, Natalia Kruszewska1

1 *Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich Al. prof. S. Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz*

2 *Gen. Ryszard Kuklinski International School of Bydgoszcz, Bośniacka 3, 85-162 Bydgoszcz*

**Korespondujący autor:** siedem@pbs.edu.pl

Śluz roślinny tworzy przestrzenną sieć biopolimerów, w której mikrofibryle celulozy stabilizowane są przez hemicelulozy i pektyny. W celu zbadania mechanizmów sieciowania przeprowadzono symulacje dynamiki molekularnej w środowisku wodnym, obejmujące włókna celulozowe, hemicelulozy i pektyny. Analizowano liczbę wiązań wodorowych, oddziaływania hydrofobowe oraz czasowy przebieg energii potencjalnej układu oraz liczby wiązań pomiędzy poszczególnymi komponentami.

Traktując energię jako sygnał poddany analizie widma mocy (PSD) wykazano, że wraz z dochodzeniem układu do równowagi (stabilizacja liczby wiązań) zmienia się charakter fluktuacji energetycznych, *1/f α*. Początkowo, gdy układ ulega reorganizacji, widmo opisuje szum różowy/brązowy (1<*α*<2), co wskazuje na obecność długozasięgowych korelacji. W miarę stabilizacji układu wykładnik *α* systematycznie maleje do wartości bliskich 0, zbliżając sygnał do szumu białego. Oznacza to, że fluktuacje energii stają się krótkokorelowane i stacjonarne, co jest spójne z osiągnięciem stanu równowagi.

Proponujemy zatem wykorzystanie koloru szumu – określanego na podstawie nachylenia widma mocy energii – jako czułego i ilościowego wskaźnika równowagi w symulacjach biopolimerów. Uzyskane wyniki sugerują, że analiza szumu może stanowić uniwersalne narzędzie do oceny stacjonarności i stabilności układów molekularnych.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Obraz zawierający zima, natura, czarne i białe, pleśń  Zawartość wygenerowana przez AI może być niepoprawna. | Obraz zawierający Sztuka dziecięca, sztuka  Zawartość wygenerowana przez AI może być niepoprawna. | Obraz zawierający linia, tekst, diagram, Wykres  Zawartość wygenerowana przez AI może być niepoprawna. |
| (a) | (b) | (c) |

Figure 1: a) obraz SEM śluzu roślinnego, b) model komputerowy, c) widma mocy szumów kolorowych.