



NATIONAL AND KAPODISTRIAN UNIVERSITY OF ATHENS

**SCHOOL OF SCIENCE
DEPARTMENT OF INFORMATICS AND TELECOMMUNICATIONS**

**INTERDISCIPLINARY POSTGRADUATE PROGRAM
"INFORMATION TECHNOLOGIES IN MEDICINE AND BIOLOGY"**

MASTER'S THESIS

**A web-based crystallographic tool for the construction of
nanoparticles**

Alexios T. Chatzigoulas

Supervisor: **Dr. Zoe Cournia**, Researcher - Assistant Professor Level,
Biomedical Research Foundation of the Academy of Athens
(BRFAA)

ATHENS

JANUARY 2018



ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ

**ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΛΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ**

**ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
"ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΣΤΗΝ ΙΑΤΡΙΚΗ ΚΑΙ ΤΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ"**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**Ένα διαδικτυακό κρυσταλλογραφικό εργαλείο για την
κατασκευή νανοσωματιδίων**

Αλέξιος Θ. Χατζηγούλας

Επιβλέπουσα: **Δρ. Ζωή Κούρνια**, Ερευνήτρια Γ', Ίδρυμα
Ιατροβιολογικών Ερευνών Ακαδημίας Αθηνών (ΙΙΒΕΑΑ)

ΑΘΗΝΑ

ΙΑΝΟΥΑΡΙΟΣ 2018

MASTER'S THESIS

A web-based crystallographic tool for the construction of nanoparticles

Alexios T. Chatzigoulas
R.N.: PIV0155

SUPERVISOR: **Dr. Zoe Cournia**, Researcher - Assistant Professor Level,
Biomedical Research Foundation of the Academy of Athens
(BRFAA)

**EXAMINATION
COMMITTEE:** **Dr. Zoe Cournia**, Researcher - Assistant Professor Level,
Biomedical Research Foundation of the Academy of Athens
(BRFAA)
Dr. Ioannis Emiris, Professor Level, National and
Kapodistrian University of Athens (NKUA), Department of
Informatics and Telecommunications (DIT)
Dr. Chrysina Evangelia, Scientific Personnel of Institute of
Biology, Medicinal Chemistry and Biotechnology, National
Hellenic Research Foundation (NHRF)

JANUARY 2018

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Ένα διαδικτυακό κρυσταλλογραφικό εργαλείο για την κατασκευή νανοσωματιδίων

Αλέξιος Θ. Χατζηγούλας

A.M.: ΤΠΙΒ0155

ΕΠΙΒΛΕΠΟΥΣΑ: **Δρ. Ζωή Κούρνια**, Ερευνήτρια Γ', Ίδρυμα
Ιατροβιολογικών Ερευνών Ακαδημίας Αθηνών (ΙΙΒΕΑΑ)

**ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ
ΕΠΙΤΡΟΠΗ:**

Δρ. Ζωή Κούρνια, Ερευνήτρια Γ', Ίδρυμα
Ιατροβιολογικών Ερευνών Ακαδημίας Αθηνών (ΙΙΒΕΑΑ)
Δρ. Ιωάννης Εμίρης, Καθηγητής, Εθνικό και Καποδιστριακό
Πανεπιστήμιο Αθηνών (ΕΚΠΑ), Τμήμα Πληροφορικής και
Τηλεπικοινωνιών (ΤΠΛ)
Δρ. Χρυσίνα Ευαγγελία, Επιστημονικό Προσωπικό,
Ινστιτούτο Βιολογίας, Φαρμακευτικής Χημείας και
Βιοτεχνολογίας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών (ΕΙΕ)

ΙΑΝΟΥΑΡΙΟΣ 2018

ABSTRACT

Nanoparticles have various applications in medicine, physics, optics, and electronics. Modeling nanoparticles is an essential first step to assess their capacity in different uses such as in energy storage or drug delivery. However, creating an initial starting conformation for modeling and simulation is tedious, because every crystalline material grows with a different crystal habit that determines its symmetry in nature.

In this diploma thesis, a web-based crystallographic tool has been created, which creates nanoparticle models from any crystal structure guided by their preferred equilibrium shape in standard conditions (crystal habit).

The algorithm uses input from quantum mechanical calculations based on the Wulff construction. The Wulff construction employs energy minimization arguments to demonstrate that specific crystal planes are preferred over others, with their distance from the origin being proportional to their surface energy. The input parameters for determining this equilibrium nanoparticle structure are the preferred growing planes as Miller indices, the energy of each plane, and the desired size of the nanoparticle.

After inputting this data, the equilibrium shape is created with the following methodology. First, based on the crystallographic point group, the symmetric planes are produced based on the Miller indices, the fractional coordination system, and the lattice parameters. In this procedure, we place the origin on the negative side of these planes, and then we calculate the intersection points per three of the planes, discarding those that are on the positive side of at least one of the planes. Then, we obtain the faces of the equilibrium shape using the Quickhull algorithm on the remaining intersection points, and the equilibrium shape is constructed by connecting these faces. The symmetric unit cell of the crystal structure is produced from the asymmetric one, using the lattice parameters and the symmetry operations of the crystallographic space group on the coordinates of the atoms again. Finally, the nanoparticle is constructed by replication of the unit cell across all three spatial directions, until the equilibrium shape is filled, and the coordinates of the atoms are output to the user.

This tool may be used to construct nanoparticles for simulation of any material given the crystal structure as input, the size of the nanoparticle, and the preferred growing planes and energies. It has been implemented as a website using C++ and PHP and can be accessed and used at <http://nanocrystal.vi-seem.eu/CrystalTool>.

A web based crystallographic tool for the construction of nanoparticles

SUBJECT AREA: Condensed Matter Physics

KEYWORDS: crystallography, nanoparticles, Wulff construction, modeling
nanoparticles, web development

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Τα νανοσωματίδια έχουν διάφορες εφαρμογές στην ιατρική, τη φυσική, την οπτική και την ηλεκτρονική. Η μοντελοποίηση νανοσωματιδίων είναι ένα ουσιαστικό πρώτο βήμα για να εκτιμηθεί η ικανότητα τους σε διάφορες χρήσεις όπως η αποθήκευση ενέργειας ή η μεταφορά φαρμάκων. Ωστόσο, η δημιουργία μιας αρχικής σύνθεσης για μοντελοποίηση και προσομοίωση είναι κουραστική, επειδή κάθε κρύσταλλος αναπτύσσεται με μια διαφορετικό *crystal habit* που καθορίζει τη συμμετρία της στη φύση.

Σε αυτή τη διπλωματική εργασία, δημιουργήθηκε ένα διαδικτυακό κρυσταλλογραφικό εργαλείο, το οποίο δημιουργεί μοντέλα νανοσωματιδίων από οποιαδήποτε κρυσταλλική δομή σύμφωνα με το προτιμώμενο σχήμα ισορροπίας τους σε τυπικές συνθήκες (*crystal habit*).

Ο αλγόριθμος χρησιμοποιεί δεδομένα από κβαντομηχανικούς υπολογισμούς βάσει της κατασκευής Wulff. Η κατασκευή Wulff χρησιμοποιεί παραμέτρους ελαχιστοποίησης της ενέργειας για να καταδείξει ότι ορισμένες έδρες προτιμώνται σε σχέση με άλλες, καθώς η απόστασή τους από τη κέντρο είναι ανάλογη με την ενέργεια της επιφάνειάς τους. Οι παράμετροι εισόδου για τον προσδιορισμό αυτής της δομής νανοσωματιδίων σε ισορροπία είναι οι έδρες που προτιμώνται να αναπτύσσονται, ως δείκτες Miller, η ενέργεια κάθε επιπέδου και το επιθυμητό μέγεθος του νανοσωματιδίου.

Μετά την εισαγωγή αυτών των παραμέτρων, το σχήμα ισορροπίας δημιουργείται με την ακόλουθη μεθοδολογία. Πρώτον, με βάση την κρυσταλλογραφική τάξη, οι συμμετρικές έδρες παράγονται με βάση τους δείκτες Miller, το κλασματικό σύστημα συντεταγμένων και τις παραμέτρους του κρυσταλλικού πλέγματος. Σε αυτή τη διαδικασία, τοποθετούμε την αρχή των αξόνων στην αρνητική πλευρά αυτών των εδρών και στη συνέχεια υπολογίζουμε τα σημεία τομής ανά τρεις έδρες, απορρίπτοντας αυτά που βρίσκονται στη θετική πλευρά τουλάχιστον ενός εκ των εδρών. Στη συνέχεια, λαμβάνουμε τις όψεις του σχήματος ισορροπίας χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Quickhull στα εναπομείναντα σημεία τομής και το σχήμα ισορροπίας κατασκευάζεται συνδέοντας αυτές τις όψεις. Η στοιχειώδης κυψελίδα της κρυσταλλικής δομής παράγεται από την ασύμμετρη κυψελίδα, χρησιμοποιώντας πάλι τις παραμέτρους του κρυσταλλικού πλέγματος και τις λειτουργίες συμμετρίας της κρυσταλλογραφικής χωρο-ομάδας στις συντεταγμένες των ατόμων. Τέλος, το νανοσωματίδιο κατασκευάζεται με την αντιγραφή της στοιχειώδης

κυψελίδας και στις τρεις χωρικές διευθύνσεις, μέχρις ότου γεμίσει το σχήμα ισορροπίας με αποτέλεσμα οι συντεταγμένες των ατόμων να εξαγονται στον χρήστη.

Αυτό το εργαλείο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την κατασκευή νανοσωματιδίων για προσομοίωση οποιουδήποτε υλικού, δεδομένης της κρυσταλλικής δομής ως είσοδο, του μεγέθους του νανοσωματιδίου και των προτιμώμενων εδρών ανάπτυξης και των ενεργειών τους. Έχει κατασκευαστεί ως διαδικτυακή σελίδα χρησιμοποιώντας τις προγραμματιστικές γλώσσες C++ και PHP και μπορεί να προσπελαστεί και να χρησιμοποιηθεί στην ιστοσελίδα <http://nanocrystal.vi-seem.eu/CrystalTool>.

ΘΕΜΑΤΙΚΗ ΠΕΡΙΟΧΗ: Φυσική Συμπυκνωμένης Ύλης

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: κρυσταλλογραφία, νανοσωματίδια, κατασκευή Wulff, σχεδιασμός νανοσωματιδίων, ανάπτυξη διαδικτυακού εργαλείου