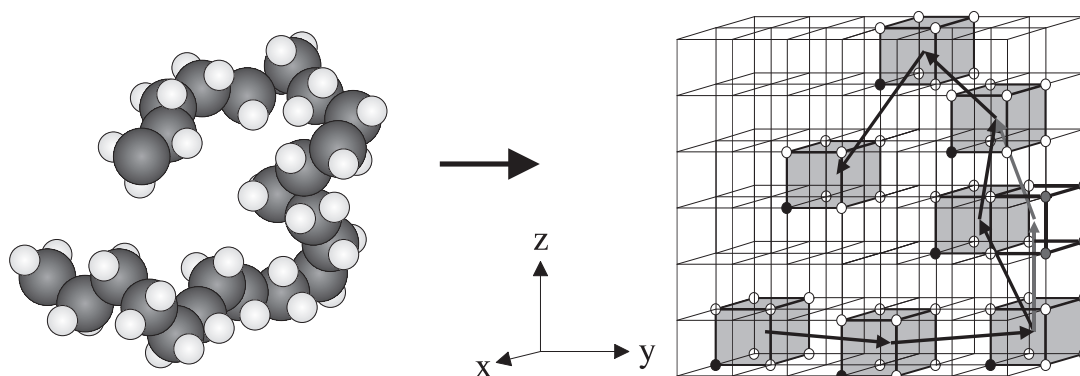


Übung 4

Das Bindungs-Fluktuations Modell (Bond Fluctuation Model)

Mit diesem Übungsblatt verwenden Sie zum ersten Mal das sogenannte “Bindungs-Fluktuations-Modell” (BFM), das in der Polymerphysik häufig zur Simulation von Schmelzen und Lösungen verwendet wird. Die tatsächliche Struktur (Valenzwinkel, Rotationsbarrieren) eines amorphen Polymers kann für eine ausreichende Zahl an Monomeren vernachlässigt werden, so dass sich die statistischen Segmente bis auf das ausgeschlossene Volumen hin frei zueinander einstellen können:



Die Bindungsvektoren werden auf die Menge B

$$B = P \pm \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cup P \pm \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cup P \pm \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cup P \pm \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \cup P \pm \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cup P \pm \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

aus 108 Bindungsvektoren zwischen den Monomeren eingeschränkt, um eine Überkreuzung der Ketten bei einer Bewegung eines Monomers zu verhindern. $P \pm$ bezeichnet dabei die Menge aller möglichen Permutationen und Vorzeichenkombinationen der Vektorkoordinaten. Auf diese Weise sind 87 verschiedene Winkeleinstellungen zwischen den Segmenten und fünf Bindungslängen (2, $\sqrt{5}$, $\sqrt{6}$, 3 und $\sqrt{10}$) möglich. Die BFM ist damit weitaus flexibler als das bisher eingesetzte Gittermodell (Übung 3) zur Simulation von Makromolekülen.

Die Bewegung eines Monomers wird folgendermaßen realisiert: Zunächst werden statisch ein Monomer und eine der 6 Bewegungsrichtungen ausgewählt. Anschließend wird überprüft, ob für die neue Position des Monomers die Bindungsvektoren zu den Kettenachbarn in B enthalten sind und ob die 4 Gitterplätze in Bewegungsrichtung noch frei sind (im Falle energetischer Wechselwirkungen würde noch der Metropolis-Algorithmus angewandt). Nur wenn diese Kriterien alle erfüllt sind, wird die Bewegung durchgeführt. Obige Abbildung zeigt einen Sprungversuch in positive y-Richtung, bei dem alle Voraussetzungen erfüllt sind.

Polymerbürsten

1. Erstellen Sie einen eigenen Updater zur Erstellung von Polymerketten mit ausgeschlossenen Volumen, deren erstes Monomer an der Grundfläche der Simulationsbox verankert ist als Modellsystem für eine Polymerbürste. Nutzen Sie dafür das FeatureFixedMonomers. Erzeugen Sie Systeme mit 8×8 Ketten aus 32 Monomeren bei Ankerpunktdichten σ $1/16$, $1/32$, $1/256$ sowie eine einzelne geankerte Kette.
2. Equilibrieren Sie die Bürste und bestimmen Sie die mittlere Höhe H . Vergleichen Sie die Abhängigkeit $H \sim \sigma$ mit der theoretischen Vorhersage.

Polymer in eingeschränkter Geometrie

1. Erstellen Sie mit dem LeMonADE Code-Paket oder einer eigenen Python Klasse eine einzelne Polymerkette mit und ohne ausgeschlossenen Volumen mit $N = 64$ in einem Spalt der Breite D_S und einer Pore mit quadratischem Querschnitt der Fläche D_P^2 mit verschiedenen Abmessungen. Beobachten Sie den Übergang von ungestörten Konformationen zu quasi zwei- bzw. ein-dimensionalen Konformationen anhand der Veränderung des End-zu-End Abstandes und des Gyrationradius. Nutzen Sie dafür die Analyzer aus der letzten Übung und den UpdaterAddLinearChains aus dem LeMonADE-repository.
2. Erstellen Sie einen Analyzer zur Berechnung der Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ (radiale Verteilungsfunktion):

$$g(r) = \frac{V}{N^2} \left\langle \sum_{j \neq i}^N \delta(r - |R_i - R_j|) \right\rangle$$

mit der Teilchenzahl N und den Monomerpositionen $\vec{R}_{i,j}$. Welche Informationen können Sie $g(r)$ entnehmen? Welche Größen lassen sich daraus ableiten?