

Simulaciones de Dinámica Molecular

Dr. Giovanni Ramírez García
*Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas,
Universidad de San Carlos de Guatemala.*

17 de noviembre de 2020

1. Introducción

En los términos más generales, una membrana es una barrera fina y selectiva. En el ámbito celular, las células están confinadas por membranas que pueden estar formadas por lípidos y que pueden tener separaciones promedio del orden de unos 50 nm [1].

Para formar una membrana de dos capas estables (*stable bilayer membrane*), se necesitan moléculas anfifílicas[1]. Estas moléculas poseen un extremo hidrofílico (que es soluble en agua) y otro que es hidrófobo (que rechaza el agua). En las membranas celulares están compuestas principalmente por fosfolípidos[1] que son moléculas anfifílicas formadas por dos cadenas de hidrocarburos, es decir compuestas por átomos de carbono e hidrógeno. En las células, la concentración crítica para formar micelas es baja[1], es decir que se necesitan pocas moléculas anfifílicas para poder formar membranas de dos capas y vesículas.

Una membrana es un fluido bidimensional con propiedades elásticas que le permiten plegarse[1]. La imagen que tenemos que tener de una membrana es la de una hoja compuesta por varias moléculas, que es estable aunque sus componentes pueden moverse de forma coordinada y, en equilibrio, se espera que tenga un movimiento Browniano relacionado a las fluctuaciones térmicas. En este proyecto no se consideran estas fluctuaciones térmicas. Las membranas también pueden cerrarse sobre sí mismas formando una vesícula.

El proyecto consiste en explorar determinar las características mediante las cuales un grupo de n moléculas podrían formar una membrana o una vesícula. Por simplicidad, consideraremos a las moléculas se como esferas duras idénticas de diámetro $2R = 1$ unidades de longitud y de masa $M = 1$ unidad de masa, y cuya interacción está dada potencial de Lennard-Jones

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

donde ϵ es determina el mínimo global del potencial y σ determina la distancia entre las moléculas a la que se encontrará ese mínimo global. En la figura 1 se puede ver el efecto del parámetro ϵ al cambiar el potencial mínimo desde $\min\{V(r)\} = -1$ para $\epsilon = 1$ hasta $\min\{V(r)\} = -2$ para $\epsilon = 2$; además se puede ver cómo se desplaza el mínimo del potencial hacia la derecha al cambiar el valor de σ .

Para entender las características del sistema, es necesario tomar distintos números de moléculas. Las moléculas van a vivir en una caja bidimensional, cuadrada, de lado $L = 10$ unidades de longitud y formada por paredes ideales que permiten que las moléculas colisionen elásticamente.

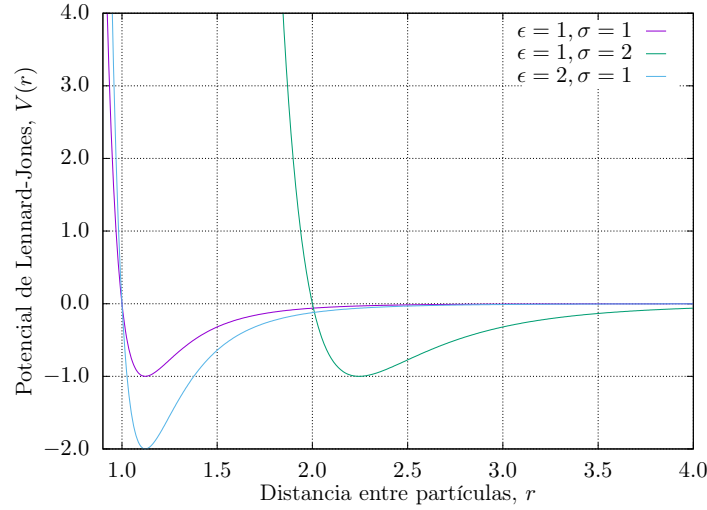


Figura 1: Potencial de Lennard-Jones para distintos valores de ϵ y σ . Fuente: Elaboración propia.

El objetivo es encontrar cuál es la densidad a partir de la cual se pueda formar una membrana o una vesícula. En ambos casos, el movimiento de las moléculas se verá como un movimiento colectivo, aunque como hay que hacer pasos discretos del tiempo (ver más adelante) también habrá que buscar el paso de tiempo adecuado.

Para cada número de moléculas elegido se deben probar distintas configuraciones iniciales de posiciones y velocidades. Cada configuración que se pruebe se debe presentar en el informe, de modo que haya un registro de que para ese número de moléculas en esa configuración inicial se forma una membrana después de transcurrido un tiempo t_c .

Si a alguien le interesa profundizar en el tema de membranas puede ver el tema a modo introductorio en el libro de Jones[1] y en el de Kleman y Lavrentovich[2], para ver el tema a un nivel intermedio-avanzado se puede consultar el libro [3].

2. El problema de n cuerpos

El problema de n cuerpos no se puede resolver analíticamente, sin embargo es posible *integrar* una solución numérica usando el método de Verlet[4] si se conocen la posición, \vec{r} , y la velocidad, $\dot{\vec{r}}$, de las moléculas; cuando el potencial de interacción entre la i -ésima y j -ésima molécula está dada por $V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$.

Consideremos que en el tiempo t_0 tendremos la configuración inicial dada por $\vec{r}_i(t_0)$ para la posición y $\dot{\vec{r}}_i(t_0)$ para la velocidad de la i -ésima molécula. Entonces, es posible obtener todas las fuerzas que actúan sobre la i -ésima molécula durante un intervalo de tiempo infinitesimal, $\Delta t = t_1 - t_0$. Las leyes de Newton nos permiten calcular la aceleración de esta molécula en este intervalo

$$\ddot{\vec{r}}_i(\Delta t) = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \vec{F}_{i,j}(t_0),$$

donde $\vec{F}_{i,j}(t_0)$ es la fuerza en la partícula i ejercida por la partícula j en el instante t_0 . Con las aceleraciones es posible obtener las posiciones y velocidades para el instante t_1 usando

$$\begin{aligned}\dot{\vec{r}}_i(t_1) &= \dot{\vec{r}}_i(t_0) + \Delta t \left[\ddot{\vec{r}}_i(\Delta t) \right], \\ \vec{r}_i(t_1) &= \vec{r}_i(t_0) + \Delta t \left[\dot{\vec{r}}_i(t_0) \right] + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left[\ddot{\vec{r}}_i(\Delta t) \right],\end{aligned}$$

entonces se puede repetir iteración temporal tras iteración temporal hasta obtener un conjunto de posiciones para cada partícula, es decir la órbita o trayectoria para cada partícula.

Este método es semejante al integrador *leap frog* y puede generalizarse a integradores de orden superior conocidos como Algoritmos de Yoshida[5] para reducir el error de aproximación al usar el algoritmo de *leap frog* en distintos instantes temporales.

Generalmente no se usa sólo las órbitas de las moléculas como evidencia del comportamiento del sistema. Es necesario hacer medidas globales, una de las medidas más usada es el momentum angular para comprobar su conservación. En este proyecto no se usará ninguna medida global (por la falta de tiempo). Si a alguien le interesa profundizar en el tema de la simulación mediante dinámica molecular puede revisar los libros de Pang[4] o en el de Scherer[6].

3. Informe

El informe es personal y debe incluir la información necesaria sobre el tema de membranas, sobre dinámica molecular, etc. Las partes del informe son

1. Resumen.
2. Introducción.
3. Marco teórico: para explicar sobre las membranas, la dinámica molecular y sobre el algoritmo que usaron.
4. Marco metodológico: para explicar cómo eligen las configuraciones iniciales y para explicar el procedimiento para hacer la simulación y el análisis de los datos.
5. Resultados: para mostrar y discutir los resultados de las simulaciones que se hicieron.
6. Conclusiones.
7. Bibliografía.

Referencias

- [1] R. A. L. Jones, *Soft Condensed Matter*. Oxford Master Series in Condensed Matter Physics, Oxford University Press, 2002.
- [2] M. Kleman and O. D. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction*. Partially Ordered Systems, Springer, 2003.
- [3] W. M. Gelbart and A. B.-S. and, eds., *Micelles, Membranes, Microemulsions, and Monolayers*. Partially Ordered Systems, Springer-Verlag, 1994.

- [4] T. Pang, *An Introduction to Computational Physics*. Cambridge University Press, second edition ed., 2006.
- [5] H. Yoshida, “Construction of higher order symplectic integrators,” *Physics Letters A*, vol. 150, no. 5, pp. 262 – 268, 1990.
- [6] P. O. J. Scherer, *Computational Physics. Simulation of Classical and Quantum Systems*. Springer, 2010.