



# Partículas Janus

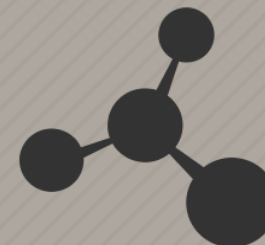
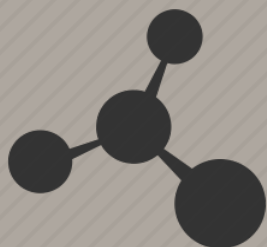
Trabalho final de Dinâmica Molecular

Anna Bárbara de Andrade Queiroz

[anna.queiroz@ufrgs.br](mailto:anna.queiroz@ufrgs.br)

Professora: Carolina Brito

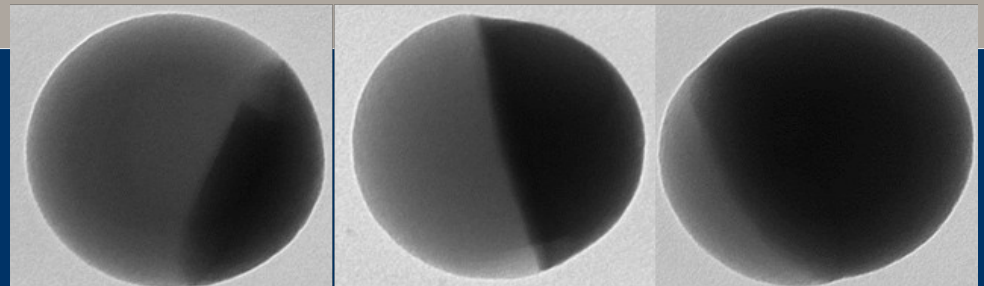
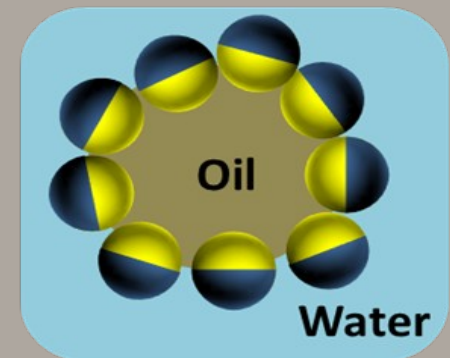
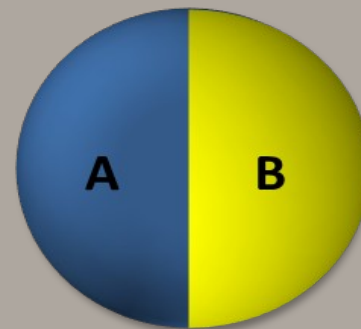
Helpers: Gustavo Ourique e Calvin Farias



# Introdução

→ Janus particles → mais de uma região distinta na mesma partícula → representam coloides irregulares.



→ Aplicações: sensores auto propulsores, dispositivos biomedicos etc ...



# Introdução

→ Simulação: Aplicação do potencial de Janus com rotação + Lennard Jones.

→ Analisamos os agregados de partículas formados, suas respectivas energias, características e estabilidade

→ Código:  + 

# Desenvolvimento

- Potencial Janus:

$$U_{\text{Janus}}(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) = \frac{C \exp[-\lambda(r_{ij} - \sigma)]}{r_{ij}^2} (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij},$$

Constante  
depende da  
temperatura

Distância entre  
as partículas i,j

Raio da partícula

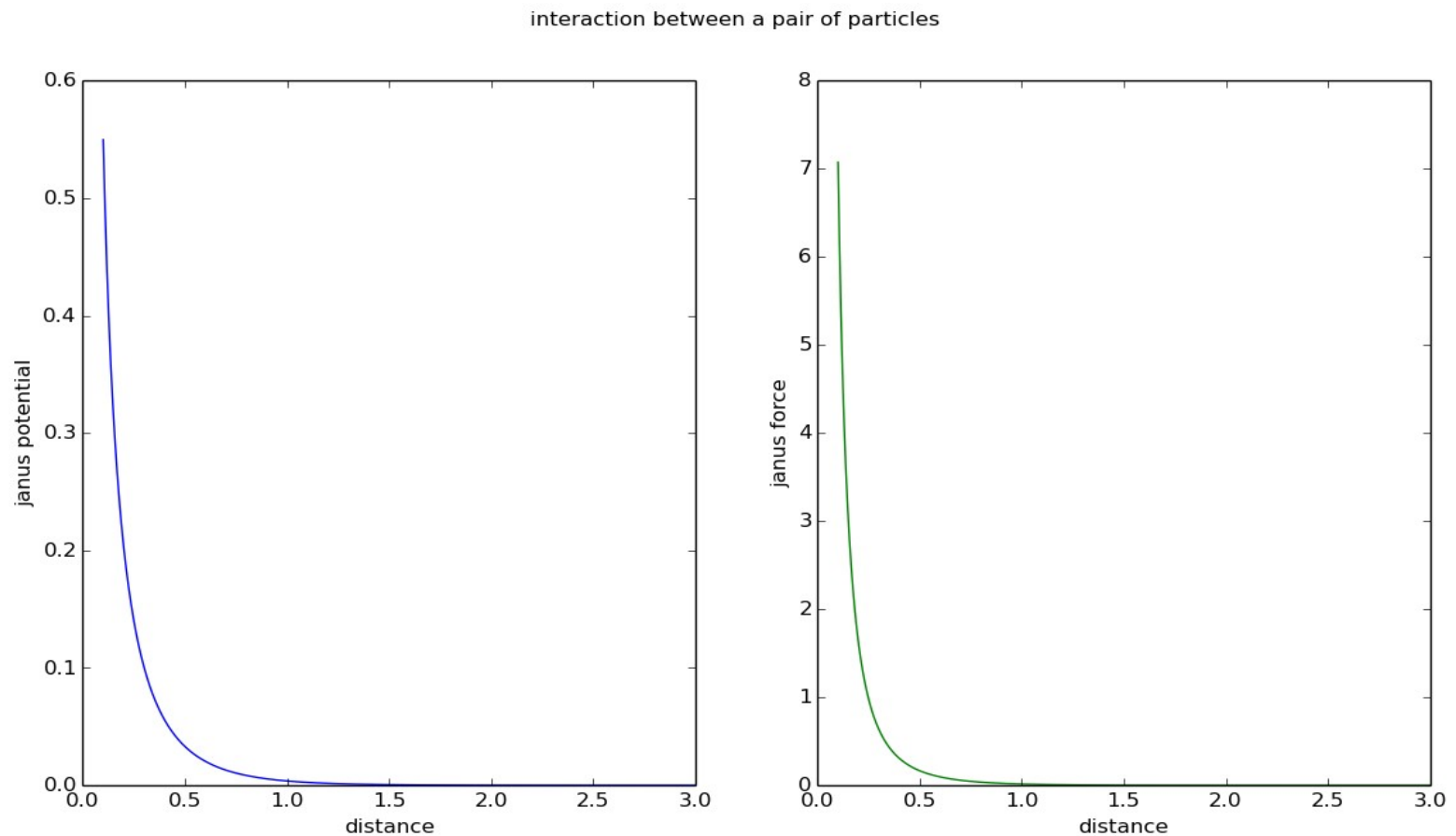
Vetores orientação,  
Esta é a parte onde está a rotação

# Desenvolvimento

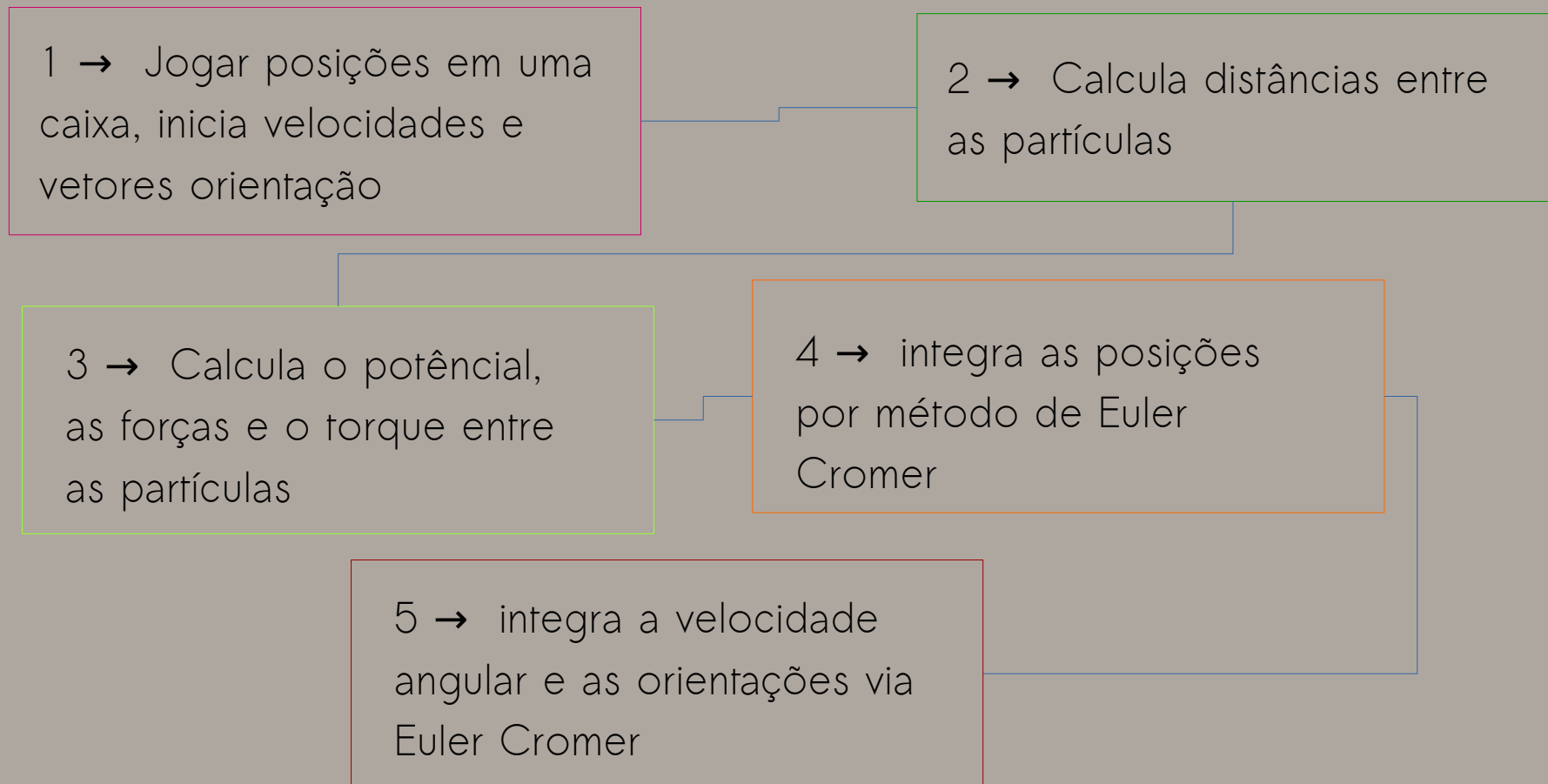
- Raio da partícula = 0.5 micrômetros
  - $\lambda = 1.5 / (\text{raio})$
  - Temperatura = 300 Kelvins
  - $k_b = 1.38 \times 10^{-5} \text{ micrometro} \times \text{miligramas} / \text{s}^2 \times \text{Kelvins}$
  - $C = 2 \times T \times k_b$
- Então nossa força tem unidades:  $\mu\text{m} \cdot \text{mg} \cdot \text{s}^{-2}$

# Desenvolvimento

- Potencial de Janus para rotação fixa



# Algoritmo para simulação



# Desenvolvimento

- informações importantes na simulação:
  - Condição de contorno periódica
  - Aplicamos amortecimento, na translação e na rotação.



# Sobre o Amortecimento

- Integramos a equação de langevin com termostato:

$$M\ddot{X} = -\nabla U(X) - \gamma M\dot{X} + \sqrt{2\gamma k_B T M} R(t),$$

Força

Constante de  
viscosidade

Gaussiana centrada  
em zero

Temperatura

Para a rotação:

$$\dot{w} = -\epsilon w + \alpha dt$$

Constante de  
viscosidade

Aceleração  
angular

# Resultados

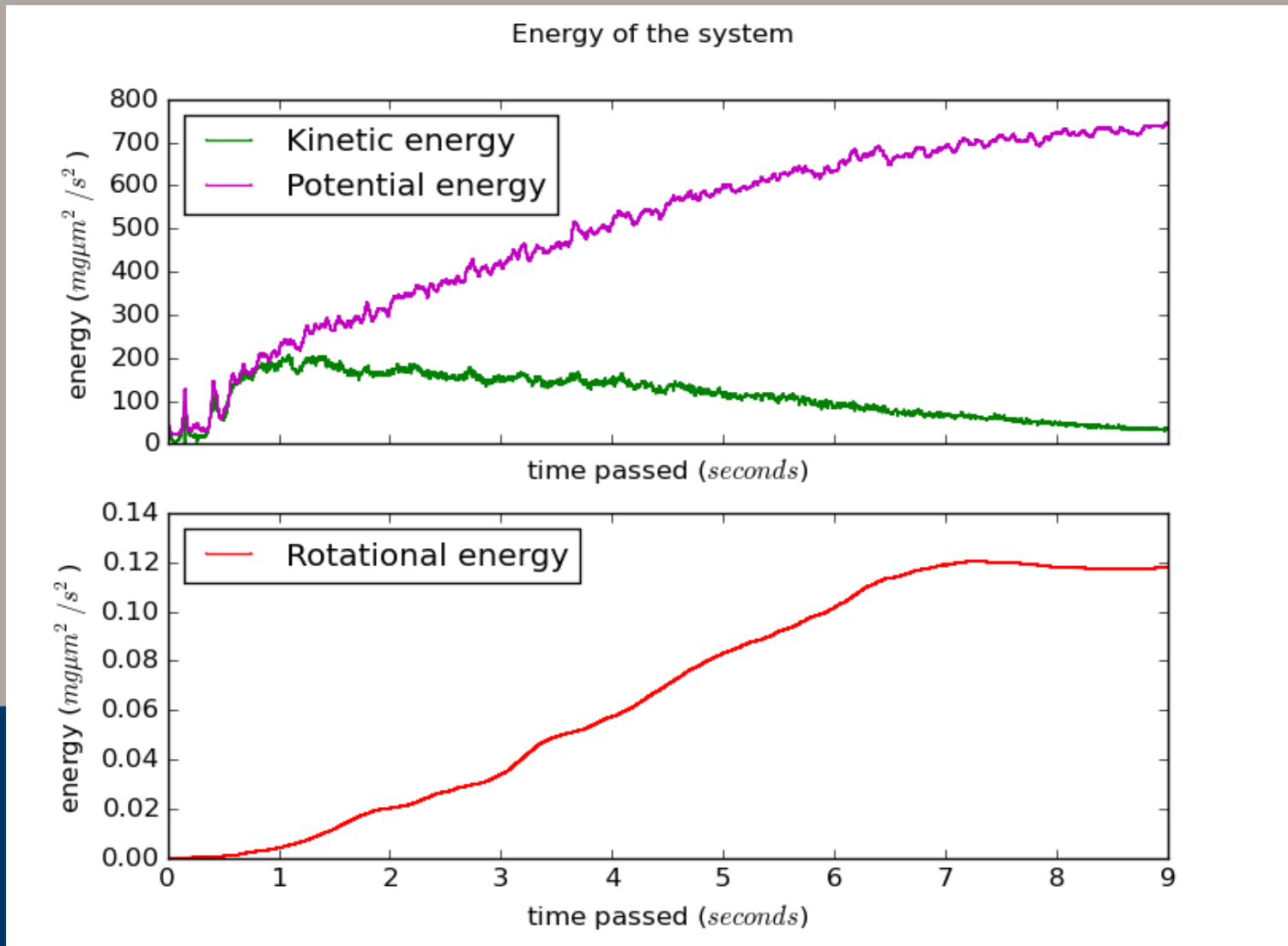
- Vimos que para agrupamentos de três partículas, o sistema é simétrico e estável.

Ver vídeo 1.

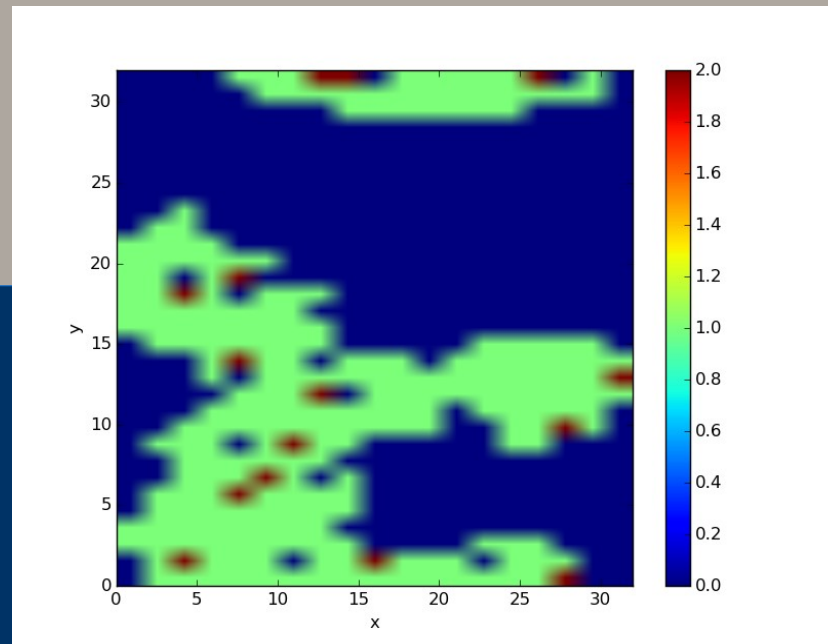
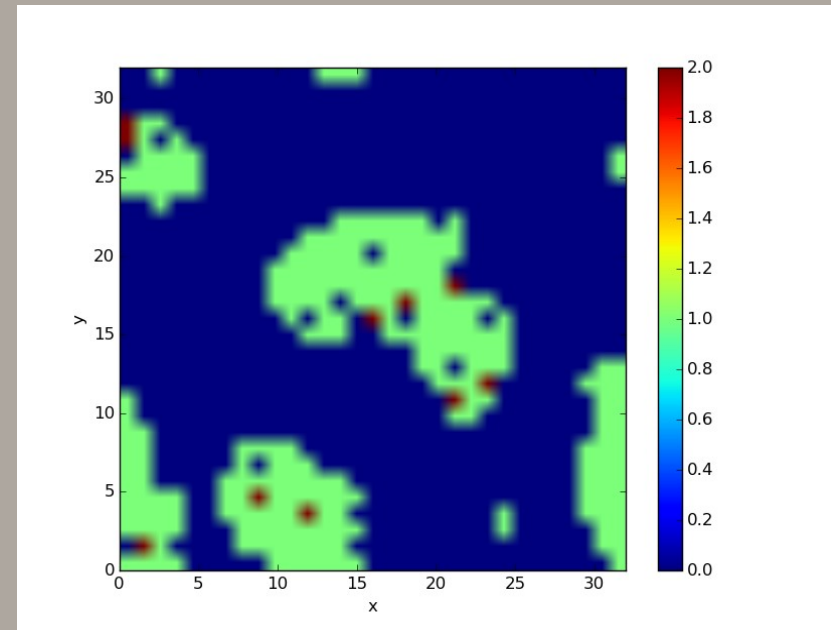
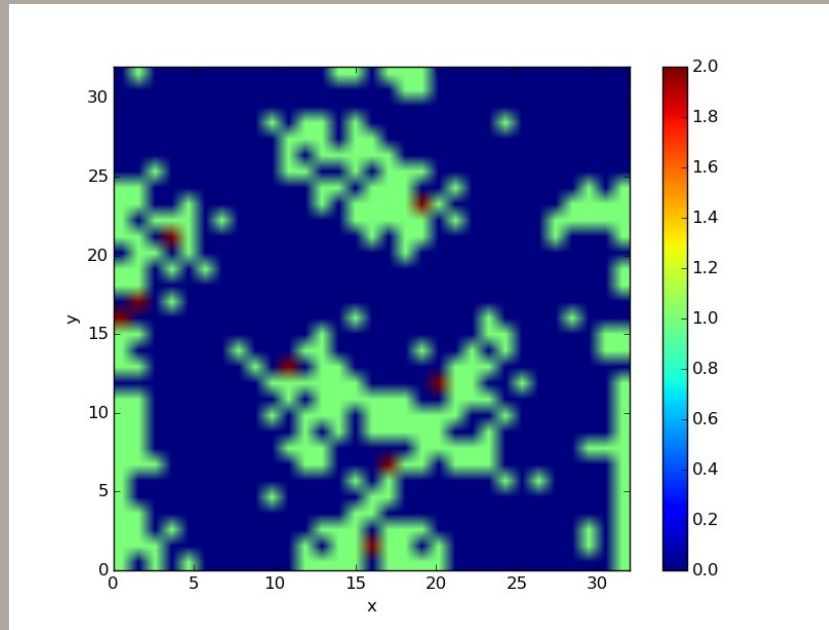
- Para agrupamentos de 7 (vídeo 2).
- Para agrupamentos de 9 (vídeo 3);
- Para agrupamentos de 49 (vídeo 4);

# Resultados

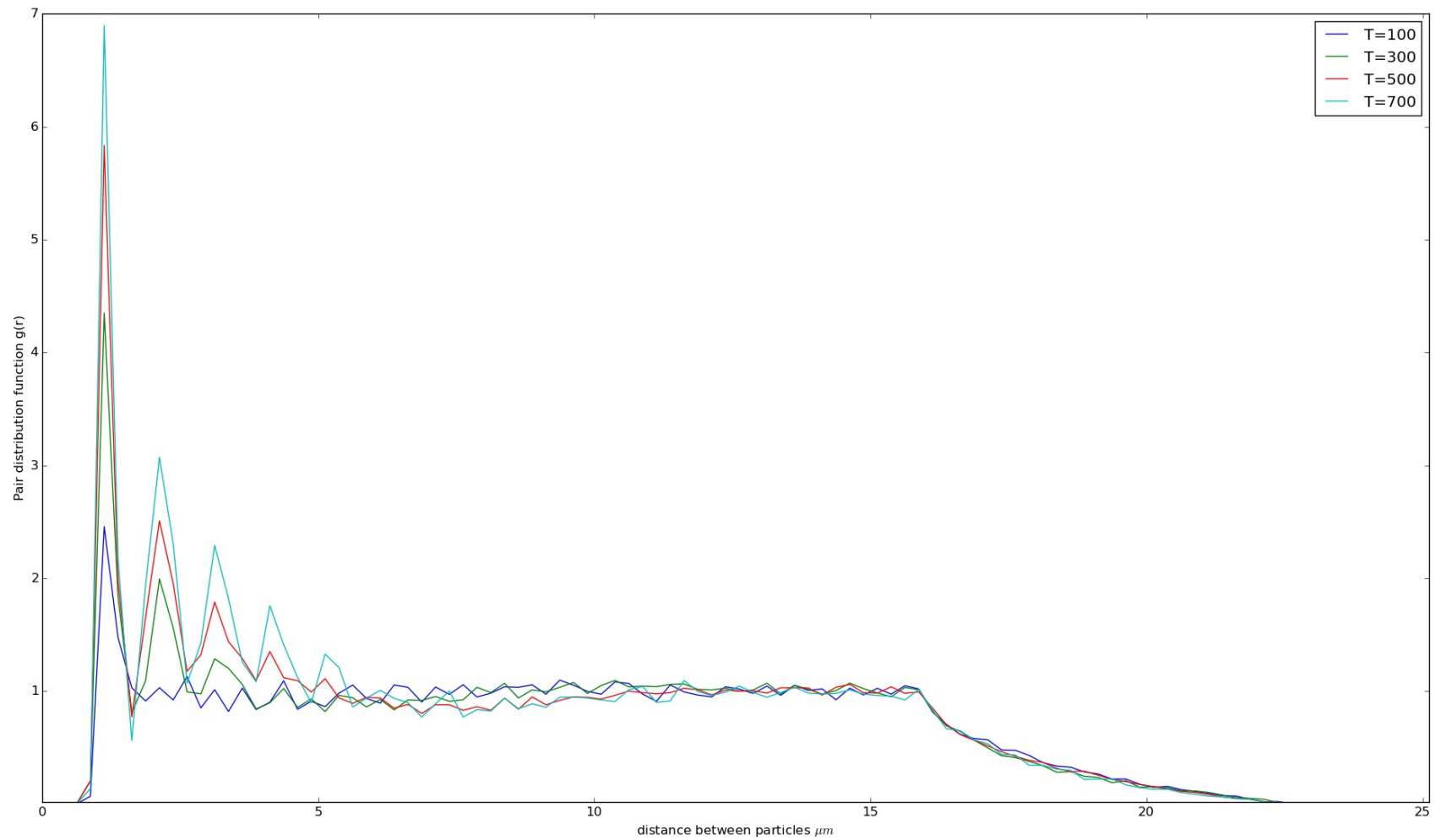
- Para um sistema com 256 partículas:



# Densidades, 3000,9000 e 30000 interações




# Pair distribution Function



# Conclusões e discussões

- Vimos que as partículas Janus formam aglomerados em estruturas coloidais
- Uma das configurações com mais facilidade de estabilização é de 3 partículas
- Tivemos que aplicar amortecimento (energia só cresce)
- Pensamentos futuros que não tive tempo de aplicar:
  - Ver os aglomerados, para diferentes tamanhos de raios
  - soma dos vetores direção em uma configuração
  - aplicar uma terceira dimensão

# Obrigada!!

encontre meus códigos em: 

[https://github.com/annabarbarella/dinamica\\_molecular](https://github.com/annabarbarella/dinamica_molecular)

contato: [anna.queiroz@ufrgs.br](mailto:anna.queiroz@ufrgs.br)