



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FCFM

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS**

Simuladores Moleculares

**Simulación de una cadena de moléculas de carbono bajo
el potencial de Lennard Jones y FENE**

Nombre:
Giovanni Gamaliel López Padilla

Matricula:
1837522

31 de octubre de 2020

1. Resumen

En este trabajo se presenta la simulación de una cadena de moléculas de carbono que se encuentran bajo los efectos del potencial de Lennard-Jones y el potencial no lineal de atracción finita (FENE). Se realizó la misma simulación un total de nueve veces, en cada una con una configuración inicial diferente en la cual se monitorizó la temperatura, energía potencial y la posición de cada molécula a lo largo de cada paso de la simulación. Al analizar el comportamiento de cada una se observó que la tendencia de la energía potencial y la temperatura son muy semejantes llegando a tener una desviación estándar de 6.65×10^{-4} en la energía potencial y 5.40×10^{-4} en la temperatura, es por ello que a pesar que tengan una gran diferencia en el movimiento de cada partícula, al analizar aspectos macroscópicos no una diferencia notable entre simulaciones. **Palabras clave:** FENE, Lennard-Jones, bidimensional, temperatura, energía potencial, cadenas de moléculas.

2. Introducción

La simulación de sistemas moleculares es de gran ayuda para poder analizar estructuras y obtener información como tensiones, fuerzas que resiste el material o los efectos en el sistema cuando está bajo ciertos ambientes o potenciales de interacción. En algunos casos se busca que el sistema se encuentre a una temperatura constante para tener un equilibrio termodinámico o mantener el sistema con esa energía interna, para lograr esto se implementan termostatos en el sistema. La simulación de estos termostatos de manera numérica puede ser implementada de diversas formas, una de ellas es el termostato de Andersen.

3. Objetivo general

Realizar una simulación de un polímero de átomos de carbono en un plano bajo la inter-

acción de Lennard-Jones y el potencial FENE.

4. Objetivo específico

- Monitorear la energía potencial durante toda la simulación del sistema.
- Monitorear la temperatura durante toda la simulación del sistema.

5. Marco teórico

El potencial de Lennard-Jones describe la energía potencial de interacción entre dos átomos o moléculas netos sujetos a dos fuerzas distintas, una fuerza que tiene mayor acción cuando la distancia entre las dos sistemas es grande y la otra fuerza de interacción tiene una mayor acción a corta distancia. Este potencial tiene la siguiente forma:

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

donde:

- V_{LJ} es el potencial intermolecular entre dos átomos o partículas.
- ϵ es la profundidad del valle que define que tan fuerte es la atracción entre partículas.
- σ es la distancia a la cual el potencial entre dos partículas es igual a cero.
- r es la distancia de separación entre dos partículas.

Los parámetros ϵ y σ son ajustados para reproducir datos experimentales o pueden ser deducidos de resultados a partir de cálculos de química cuántica.

En donde expone una gráfica de potenciales universales para estructuras de grafito, y la que tenemos se asemeja en comportamiento a pesar de no tener la estructura de un grafito. Teniendo el potencial de la ecuación 1, podemos deducir la fuerza, ya que esta puede ser deducida a partir de aplicar

el gradiente a la función $V(r)$, teniendo así la siguiente expresión:

$$\vec{F}(r)_{LJ} = 48\epsilon \left(\frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - \frac{1}{2} \frac{\sigma^6}{r^7} \right) \hat{r}, \quad (2)$$

reescribiendo las ecuaciones 1 y 2 para tener la suma de estas en un sistema de n partículas se tiene lo siguiente:

$$U_t = \left\langle \sum_{i=1}^{N-1} V_{i,j}(|r_j - r_i|) \right\rangle_t. \quad (3)$$

$$F_{LJ} = \frac{48}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{N-1} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{i,j}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{r_{i,j}} \right)^8 \right] (r_j - r_i). \quad (4)$$

El potencial no lineal de atracción finita (FENE) considera que las cadenas moleculares no pueden extenderse de manera infinita, si no que estas tienen una distancia máxima. El potencial FENE tiene la siguiente estructura:

$$V_{FENE} = -\frac{1}{2} k_f R_0^2 \sum_{i=1}^{N-1} \log \left(1 - \left[\frac{r_{i,j}}{R_0} \right]^2 \right), \quad (5)$$

donde

- V_{FENE} es el potencial FENE entre dos moléculas continuas.
- K_f es la constante de resistencia.
- R_0 es la distancia máxima de las cadenas moleculares.
- r_{ij} es la distancia entre la molécula i y j, donde $j = i + 1$.

Obteniendo el término para la fuerza debido al potencial FENE se obtiene la siguiente expresión:

$$F_{FENE} = -K_f \frac{R_0^2}{R_0^2 - r_{ij}^2}. \quad (6)$$

El potencial de Lennard-Jones y el potencial FENE serán utilizados en la siguiente distribución:

$$V(r) = \begin{cases} V_{LJ} + V_{FENE} & r_{ij} < R_0 \\ 0 & r_{ij} \geq R_0 \end{cases} \quad (7)$$

Usando a $R_0 = 1.3$, se obtiene que el potencial actuando sobre el sistema es el mostrado en la figura 1 junto con la fuerza que esta mostrada en la figura 2.

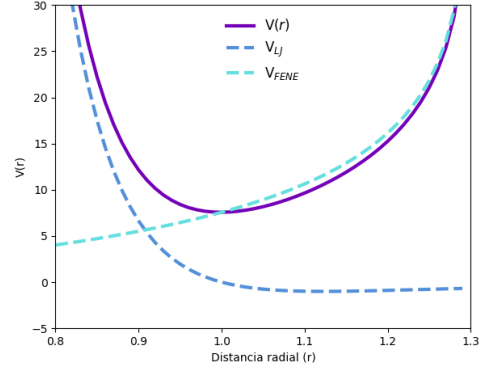


Figura 1: Potencial de Lennard-Jones y FENE

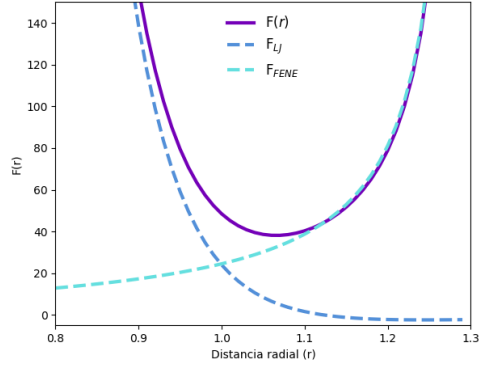


Figura 2: Fuerza de Lennard-Jones y FENE

Teniendo definidos los potenciales que actuarán en la simulación la energía cinética del sistema se estará monitoreando de la siguiente manera:

$$T_t = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m |v_i(t)|^2 \right\rangle \quad (8)$$

por lo tanto, la energía total para un tiempo t será:

$$E_t = T_t + U_t \quad (9)$$

| Número de moléculas | Número de pasos | Número de ejecuciones | ϵ_{LJ} | σ_{LJ} | K_f | R_0 |
|---------------------|-----------------|-----------------------|-----------------|---------------|-------|-------|
| 50 | 2×10^5 | 9 | 1 | 1 | 10 | 1.3 |

Tabla 1: Parámetros para las diferentes simulaciones del sistema de cadenas de moléculas bajo el potencial de Lennard-Jones y el potencial FENE.

6. Resultados

La configuración inicial que se le dio a cada sistema esta dado por las siguientes ecuaciones:

$$x_{i+1} = (i - 1) * 0.9 + a$$

$$y_{i+1} = \begin{cases} 0.5 + a & \text{mod}(i, 2) = 0 \\ a & \text{mod}(i, 2) \neq 0 \end{cases}$$

donde a representa un número aleatorio entre -0.1 y 0.1. Con ello, las configuraciones iniciales de cada ejecución del modelo estan mostradas en la figura 3.

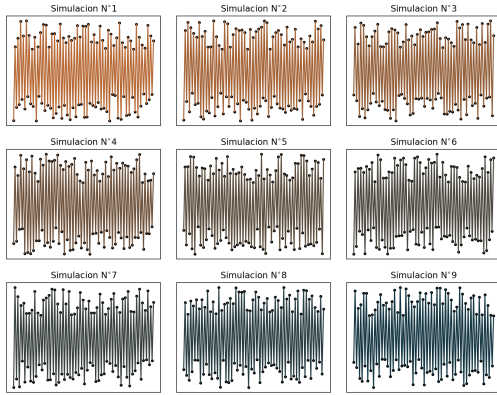


Figura 3: Configuración inicial de las cadenas de moléculas.

Las velocidades de cada molécula fueron dada siguiendo las siguientes ecuaciones:

$$v_{xi} = v_0 \cos(2v_0\pi)$$

$$v_{yi} = v_0 \sin(2v_0\pi)$$

donde v_0 es un número aleatorio entre 0 y 1. Los parámetros usados para cada simulación son los que se muestran en la tabla 1, la dinámica que presento cada simulación estan guardadas en el siguiente link ([simulaciones.mp4](#)). En cada una de ellas se realizó

la monitorización de la energía potencial, energía cinética y las posiciones de cada molécula. En la figura 4 se visualiza como es la evolución a diferentes tiempos de una simulación.

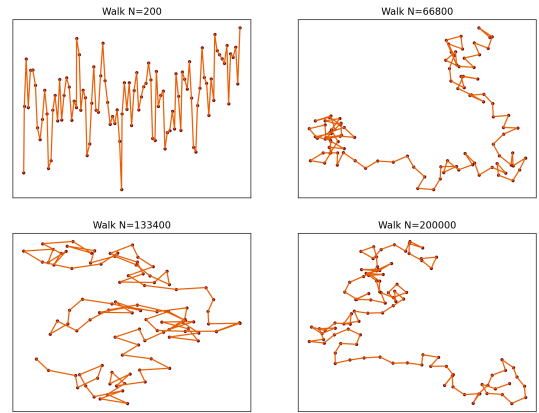


Figura 4: Dinámica de una simulación de la cadena de moléculas a diferentes tiempos.

Realizando el calculo de la temperatura del sistema a cada paso de la simulación se obtuvo la figura 5.

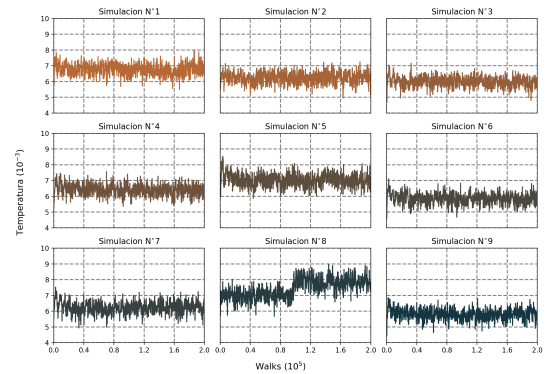


Figura 5: Temperatura de las diferentes simulaciones de la cadena de moléculas bajo el potencial de Lennard-Jones y el potencial FENE.

Y observando la variación de la energía potencial a lo largo de la simulación se obtuvo la figura 6.

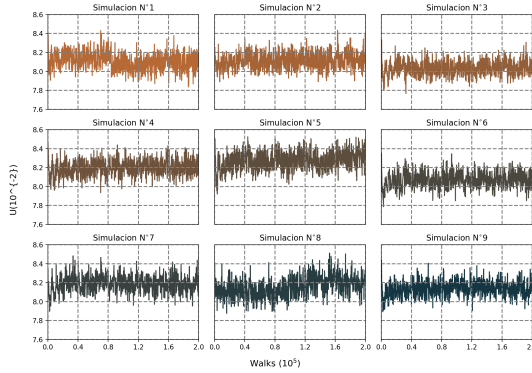


Figura 6: Energía potencial de las diferentes simulaciones de la cadena de moléculas bajo el potencial de Lennard-Jones y el potencial FENE

Obteniendo un valor medio de la temperatura y la energía potencial se obtiene la tabla 2.

| Simulación | $\bar{U}(r)$ | \bar{T} |
|------------|--------------|-----------|
| 1 | 0.0811 | 0.0068 |
| 2 | 0.0811 | 0.0063 |
| 3 | 0.0804 | 0.006 |
| 4 | 0.082 | 0.0064 |
| 5 | 0.0827 | 0.007 |
| 6 | 0.0807 | 0.0059 |
| 7 | 0.0819 | 0.0062 |
| 8 | 0.0815 | 0.0074 |
| 9 | 0.0814 | 0.0058 |

Tabla 2: Valores medios de la energía potencial ($\bar{U}(r)$) y la temperatura (\bar{T}) en cada simulación realizada.

En donde la desviación estandar de cada valor es:

$$\sigma_U = 6.65 \times 10^{-4}$$

$$\sigma_T = 5.40 \times 10^{-4}$$

7. Conclusiones

Las simulaciones de cadenas de moléculas afectadas por los potenciales de Lennard-Jones y el potencial FENE presentan situaciones caóticas, esto debido a que aun que sean mínimas las diferencias entre posiciones y velocidades iniciales de cada molécula esta lleva a presentar una dinámica muy diferente, en cambio la temperatura y la energía potencial presentan una evolución oscilante independientemente de cual sean las condiciones iniciales y la mayoría ronda por valores semejantes en el promedio, es por ello que aunque la dinámica sea diferente los fenómenos macroscópicos guardan una misma tendencia.

8. Código

■ MD-n2.f

Este código realiza la simulación de cada sistema tomando en cuenta al potencial de Lennard-Jones y al potencial FENE.

■ run.py

Este código es el encargado de ejecutar al modelo varias veces automáticamente.

■ Potencial_Graphics.py

Este código realiza el cálculo de los potenciales y fuerzas de Lennard-Jones y FENE para generar las figuras 1 y 2.

■ Dim_Graphics.py

Este código realiza cuatro capturas de la dinámica de una simulación para generar la figura 4.

■ temp_graphics.py

Este código realiza el cálculo de la temperatura para generar la figura 5.

■ Energy_Graphics.py

Este código realiza la captura de la energía potencial de cada simulación para generar la figura 6.

- [Dim.gif.py](#)
Este código realiza una animación de la dinámica de cada simulación.

Referencias

- [1] Monica Bulacu. Molecular Dynamics Studies of Entangled Polymer Chains. *Advanced Materials*, (49):152, 2008.
- [2] Bogdan Z. Dlugogorski, Miroslav Grmela, and Pierre J. Carreau. Viscometric functions for FENE and generalized Lennard-Jones dumbbell liquids in Couette flow: molecular dynamics study. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 48(3):303–335, 1993.
- [3] Ondřej Kreml and Milan Pokorný. On the local strong solutions for the fene dumbbell model. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S*, 3(2):311–324, 2010.
- [4] N. W. Lima, L. I. Gutierrez, R. I. Gonzalez, S. Müller, R. S. Thomaz, E. M. Bringa, and R. M. Papaléo. Molecular dynamics simulation of polymerlike thin films irradiated by fast ions: A comparison between FENE and Lennard-Jones potentials. *Physical Review B*, 94(19):1–8, 2016.
- [5] Julien Morthomas, Claudio Fusco, Zengqiang Zhai, Olivier Lame, and Michel Perez. Crystallization of finite-extensible nonlinear elastic Lennard-Jones coarse-grained polymers. *Physical Review E*, 96(5):1–10, 2017.
- [6] Giuseppe Mulone and Brian Straughan. Boundary conditions for the microscopic FENE models*. 69(6):1739–1758, 2009.
- [7] Armando Rodulfo Reyes. Absorción de un polímero doble atado a una superficie.
- [8] Juan David Torrenegra, Juan Pablo Hernandez-Ortiz, and Jarol Molina. Modelo mesoscópico de una membrana de intercambio protónico. *Revista CIN-TEX*, 23(2):76–85, 2018.
- [9] A. P.G. Van Heel, M. A. Hulsen, and B. H.A.A. Van Den Brule. On the selection of parameters in the FENE-P model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 75(2-3):253–271, 1998.