



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 átomos de carbono bajo
el potencial de Lennard Jones y FENE

Nombre:
Giovanni Gamaliel López Padilla

Matricula:
1837522

7 de noviembre de 2020

1. Resumen

En este trabajo se presenta la simulación de una cadena de átomos 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 ente se observó que la tendencia de la energía potencial y la temperatura es ser oscilantes en el tiempo, se observa también que conforme se aumentan el número de átomos en la simulación, las gráficas se definen más, llegando a tener la apariencia de una onda la cual es amortiguada, esto nos puede dar indicios a que la cadena de átomos llegara a estar en equilibrio después de un tiempo. Observando los promedios de la distancia entre el primer y último átomo de la simulación se observa que esta sigue una tendencia ascendente con una semejanza a una función logarítmica.

Palabras clave: FENE, Lennard-Jones, bidimensional, temperatura, energía potencial, cadenas de átomos.

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 interacción 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 átomos netos sujetos a dos fuerzas distintas, una fuerza que tiene mayor acción cuando la distancia entre los 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 átomos 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 molecula 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.

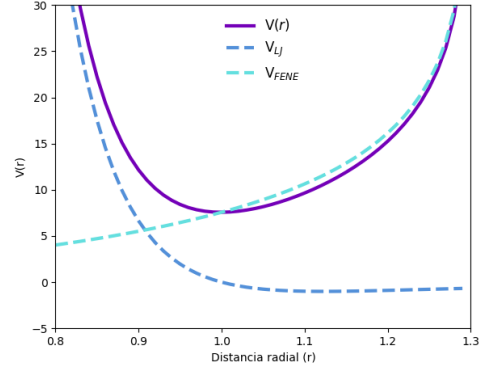


Figura 1: Potencial de Lennard-Jones y FENE

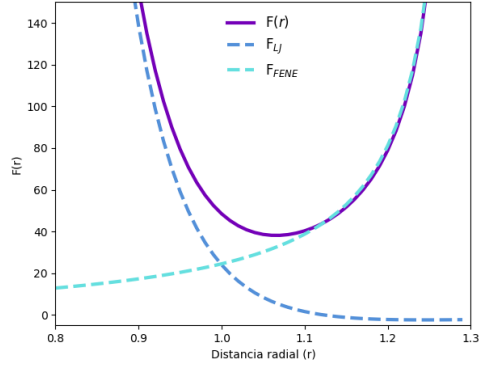


Figura 2: Fuerza de Lennard-Jones y FENE

Teniendo definidos los potenciales que actuaran 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 átomos	Número de pasos	ϵ_{LJ}	σ_{LJ}	K_f	R_0
Variable*	2×10^5	1	1	10	1.3

Tabla 1: Parámetros para las diferentes simulaciones del sistema de cadenas de átomos bajo el potencial de Lennard-Jones y el potencial FENE. El número de átomos en cada simulación fueron la siguientes: 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900.

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.

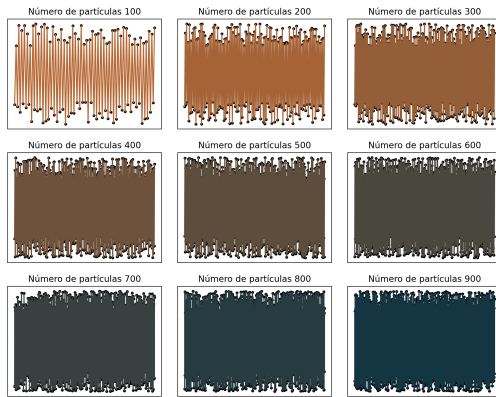


Figura 3: Configuración inicial de las cadenas de átomos en cada simulación.

Las velocidades de cada molecula 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 molecula. En la figura 4 se visualiza la dinámica de la cadena de 900 átomos.

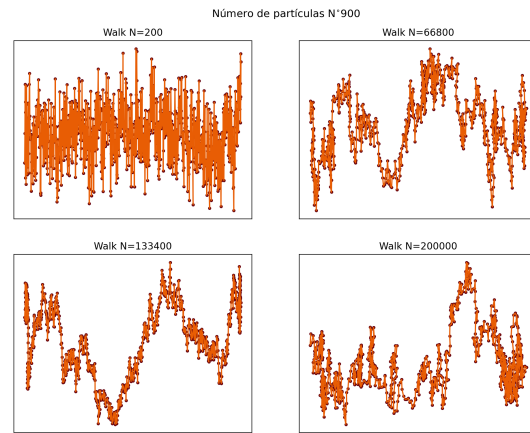


Figura 4: Dinámica de una simulación de la cadena de 900 átomos a diferentes tiempos.

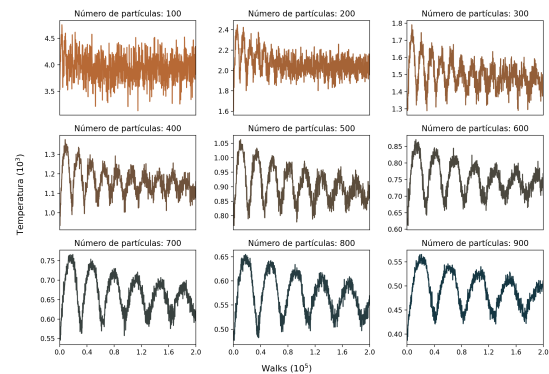


Figura 5: Temperatura de las diferentes simulaciones de la cadena de átomos bajo el potencial de Lennard-Jones y el potencial FENE.

Realizando el calculo de la temperatura del sistema a cada paso de la simulación se obtuvo la figura 5. Observando la variación de la energía potencial a lo largo de la simulación se obtuvo la figura 6.

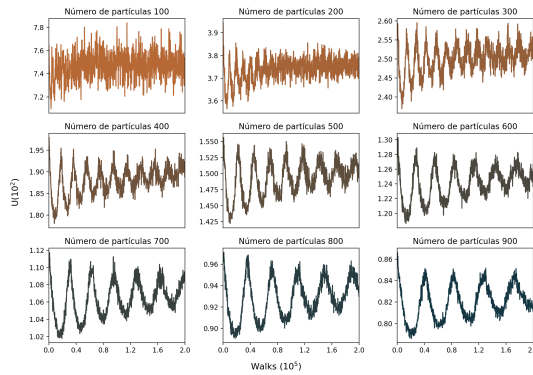


Figura 6: Energía potencial de las diferentes simulaciones de la cadena de átomos bajo el potencial de Lennard-Jones y el potencial FENE.

Obteniendo la distancia entre el primer átomo y último átomo de la cadena de monómeros para cada cierta cantidad de pasos, llamando a esto como distancia inicio fin, en nuestro caso esta información era calculada cada 500 pasos, por lo que se obtuvo un valor promedio, estos valores son mostrados en la figura 7

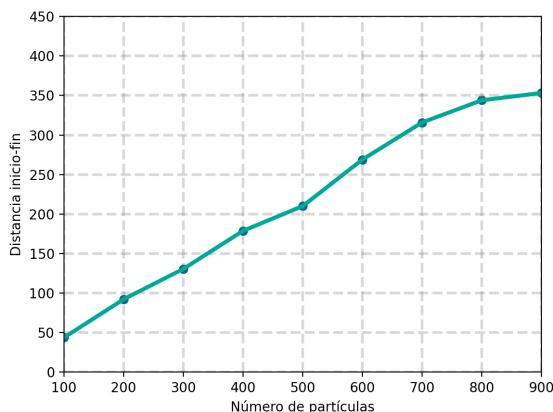


Figura 7: Promedios de la distancia inicio fin de cada simulación realizada.

7. Conclusiones

Las simulaciones de cadenas de átomos 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 molecula 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, se observó que conforme aumenta la cantidad de átomos en la simulación, esta oscilación en las energías es más visible y conforme se aumentan los pasos el valor máximo de la oscilación va disminuyendo haciendo notar que esta en algún momento llegara a un estado de equilibrio.

Visualizando las diferentes animaciones de cada simulación se aprecia como esta presenta un movimiento ondulatorio pareciendose casi como una cuerda atada de los extremos creando efectos de ondas constructivas y destructivas.

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 en el encargado de ejecutar al modelo varias veces automaticamente.

■ Potencial_Graphics.py

Este código realiza el calculo 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 calculo 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.
- [dis.mean.py](#)
Este código realiza el calculo promedio de la distancia entre el primer y último átomo, creando así la figura 7.

Referencias

- [1] Monica Bulacu. Molecular Dynamics Studies of Entangled Polymer Chains. *Advanced Materials*, (49):152, 2008.
- [2] Bogdan Z. Dlugogorski, Mirosław 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.