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 un polimero 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 red cuadrangular de átomos de carbono para diferentes densidades bajo la interacción del potencial de Lennard-Jones y un termosatato de Andersen. Se realizó un monitoreo a la energía cinetica, energía potencial, energía total, la temperatura a y la velocidad de cada particula lo largo del sistema para observar su comportamiento. Esta ultima se logro apreciar que describe una distribución normal ,ya que fue afectada por el termosatato de Andersen. Al termino de cada simulación se obtuvo la distribución radial observando que los átomos tienden a centrarse a un radio de 1 presentado fluctuaciones en distancias largas.
Palabras clave: Termostato de Andersen, Lennard-Jones, bidimensional, temperatura, distribución normal

2. Introducción

La simualación de sistemas moleculares es de gran ayuda para poder analizar estrucuturas y obtener información como tensiones, fuerzas que resiste el material o los efectos en el sistema cuando esta bajo ciertos ambientes o potenciales de interacción. En algunos casos se busca que el sistema se encuentre a una tempereratura constante para tener un equilibrio termodinámico o mantener el sistema con esa energía interna, para lograr esto se implementan termostatos en el sistema. La simualación 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 simualción de un polimero de átomos de carbono en un plano bajo la interacción de Lennard-Jones y el potencial FENE.

4. Objetivo especifico

- 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 moleculas netros 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:

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

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 gráfito, y la que tenemos se asemeja en comportamiento a pesar de no tener la estrucura 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:

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

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

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

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

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:

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

donde

- V_{FENE} es el potencial FENE entre dos moleculas 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:

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

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

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

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.

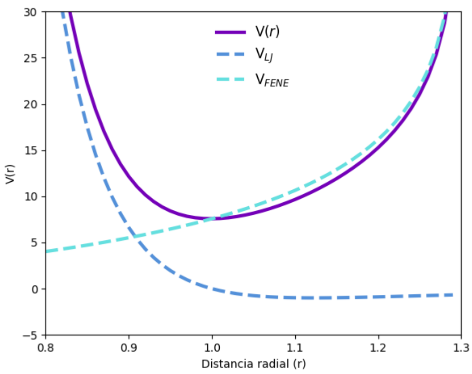

Figura 1: Potencial de Lennard-Jones y FENE

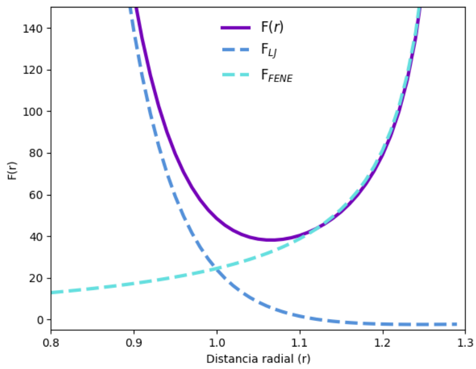

Figura 2: Fuerza de Lennard-Jones y FENE

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

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

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

$$E_t = T_t + U_t \tag{9}$$

6. Resultados

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

$$x_{i+1} = (i-1) * 0.9 + a$$
$$y_{i+1} = \begin{cases} 0.5 + a & mod(i,2) = 0 \\ a & mod(i,2) \neq 0 \end{cases}$$

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.

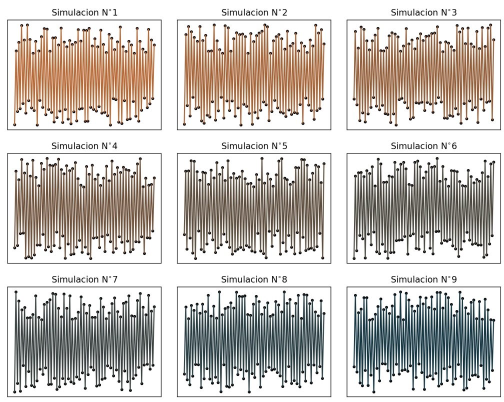

Figura 3: Configuración inicial de las cadenas de moleculas.

Número de moleculas	Número de pasos	Número de ejecuciones	ϵ_{LJ}	σ_{LJ}	K_f	R_0
50	$2x10^5$	9	1	1	10	1.3

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

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

7. Conclusiones

La implemententación del termostato de Andersen es eficiente para obtener un sistema en equilibro termodinamico, pero la distribución radial se ve afectada, ya que no presenta valores definidos en los cuales tenga curvas suaves. En cambio, si lo que se prefiere es que las velocidades de las particulas formen una distribución uniforme el termostato de Andersen podrá realizarlo.
La estabilidad en las energías no es algo de esperarse de este contexto, ya que el cambio en las velocidades puede ser drastico y con ello formar pendientes altas en esta función.

8. Código

- Dim_Graphics.py
- Energy_Graphics.py
- MD-n2.f
- Potencial_Graphics.py
- Dim_gif.py
- run.py
- temp_graphics.py

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. Gutierres, 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] 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.