

SZÁMÍTÓGÉPES MODELLEZÉS

Molekuladinamika

Készítette:

Bagoly Attila

2017.01.05



1. Bevezetés

A feladat célja a HOOMD-blue molekuladinamikai szimulációs szoftverrel való megismerkedés.

2. Telepítés

A program telepítése a holnapon leírtaknak alapján zökkenőmentesen történt.

3. Vizualizáció

VMD és OVITO vizualizációs programcsomagokat próbáltam ki. HOOMD-blue kimenetének gsd típust választottam, ezt csak az OVITO program tudta megjeleníteni. Egy másik lehetőség volt a gcd kimenet, amelyet a VMD is meg tud jeleníteni. Azonban a VMD-t használva a különböző polimereket nem tudtam megfelelően beszínezni ezért nem használtam ezt a programot. Az OVITO programban jelenleg van egy fura bug: ha többféle atom van, akkor az első időlépésben még kiszínezi aztán a következő időlépésekben minden ugyanolyan színű lesz. Ezen problémára nem találtam megoldást. Úgy trükköztem ki, hogy a gsd python csomag segítségével kiírtam gsd filebe különböző snapshotokat és azokat egyesével megjelenítettem.

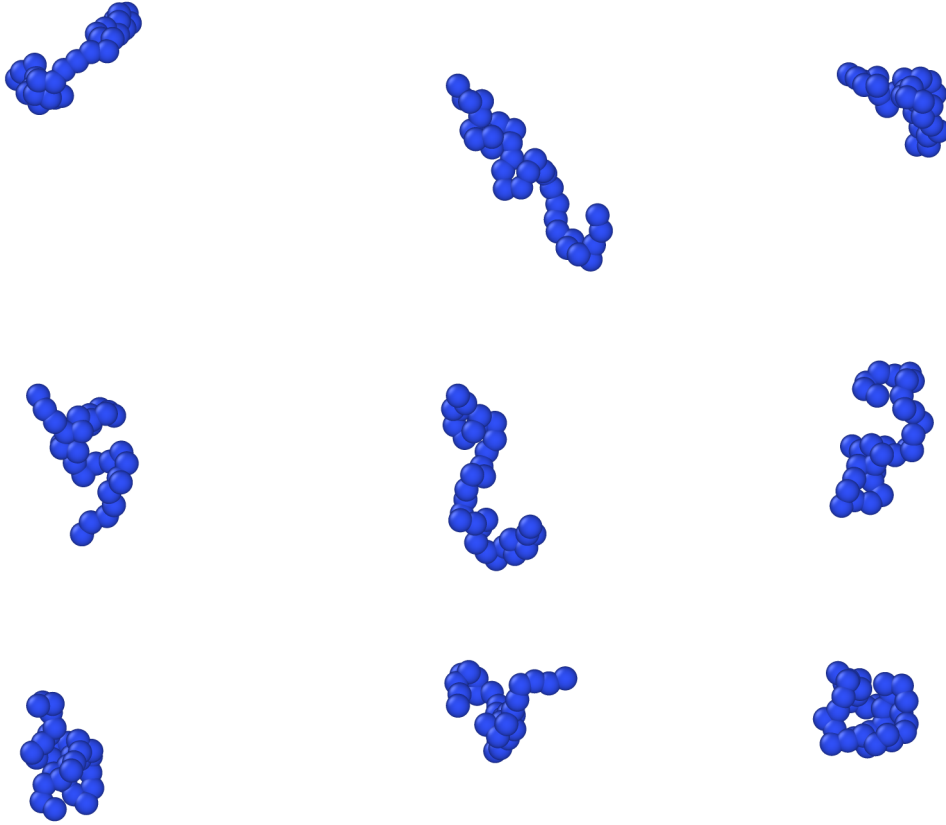
4. Rögzített végű polimer

Ezen feladat során nagyrészt polimereket vizsgáltam. Bevezetőként megnéztem, hogy egy 32 atom hosszú polimer, melynek vége rögzített magas hőmérsékleten a vártak megfelelően viselkedik-e.

A `hoomd.deprecated.init` objektumnak a `create_random_polymers` függvényét használtam, amely mint neve sejteti véletlen polimereket generál. Ennek a függvénynek megadom az atomok típusát, számát, bondokat, szeparációs távolságot és ezen alapján legenerál egy random polimert, vagy akár többet is. A `bond` paraméternek kötések megadása helyett a "linear" kulcsszót használtam, ekkor a generátor úgy köti össze az atomokat, hogy egy lineáris láncot alkossanak.

A generált atomok szomszédaival való kölcsönhatásra harmonikus potenciált állítottam be (rugómodell). Emelet Lennard-Jones potenciált használtam az atomok közti kölcsönhatás leírására.

A `hoomd.md.integrate.brownian` integrálót használtam, melyel magas hőmérsékleten végezve a futtatást, a kapott animáció különböző időszeletei a 4 ábrán láthatók.



1. ábra. Rögzített végű polimer. Időfejlődés: balról jobbra, fentről le

5. Kétféle, azonos hosszú polimer keveredése

Ebben az esetben vizsgáltam kétféle azonos hosszú polimer keveredését. Az előző pontban ismertetett módon, generáltam 500-500 polimert véletlen módon elhelyezve. A bondok kölcsönhatásainak szintén harmonikus potenciált használtam. Az atomok közti kölcsönhatásra a hoomd.md.pair.dpd_conservative által biztosított DPD potenciált használtam.

Disszipatív részecske dinamika (DPD) esetén a részecskére ható erőket felbontjuk:

$$F = F_C(r_{ij}) + F_{R,ij}(r_{ij}) + F_{D,ij}(v_{ij}), \quad (1)$$

ahol $F_{D,ij}(v_{ij})$ párok közti ellenálló erő, $F_{R,ij}(r_{ij})$ egy véletlen erő (környezet hőmérsékletének hatása), F_C a párok közti konzervatív erőtér. A fent említett függvény, az utóbbi erő származtatására, a következő potenciált alkalmazza:

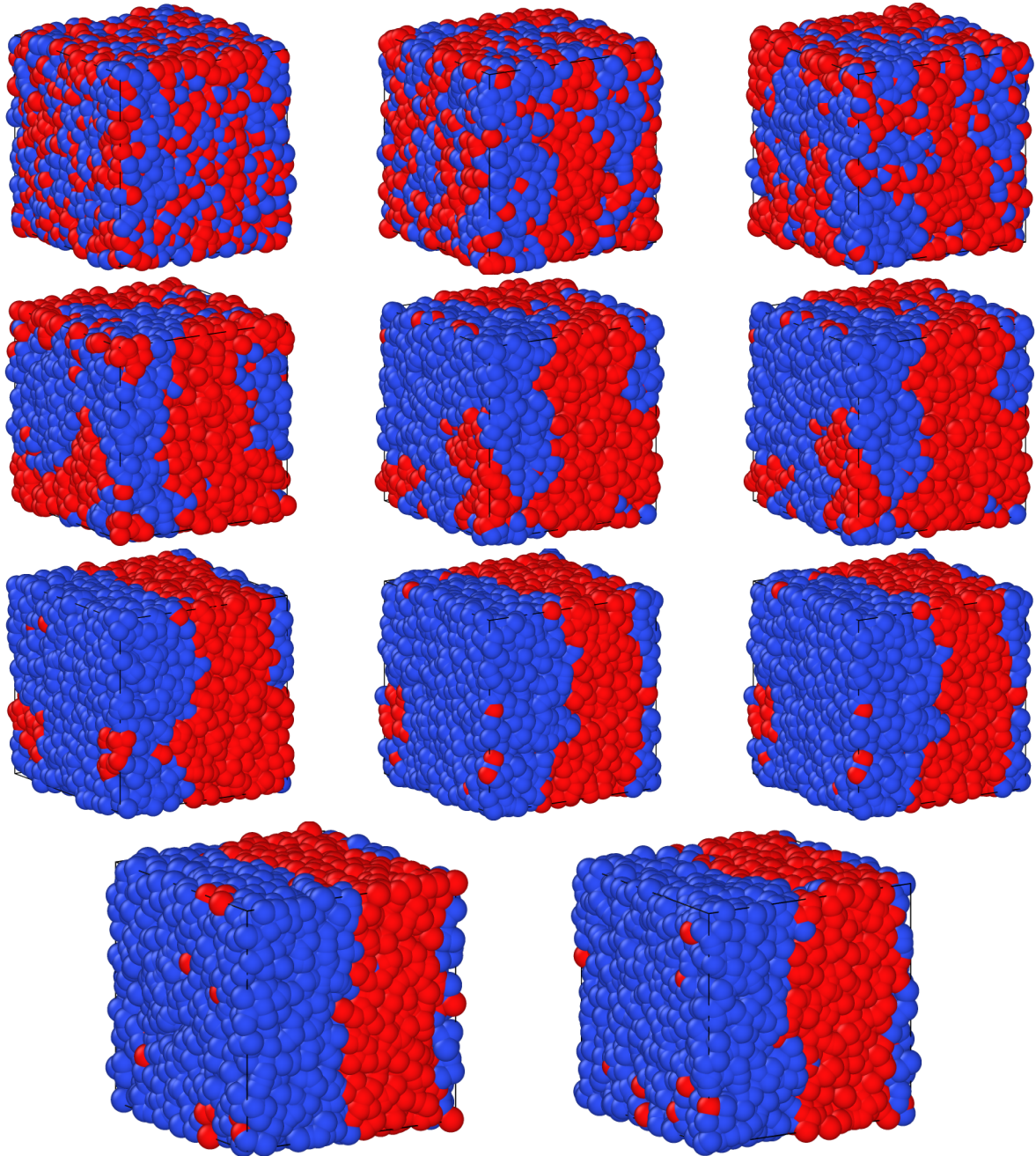
$$V_{\text{DPD-C}}(r) = A \cdot (r_{\text{cut}} - r) - \frac{1}{2} \cdot \frac{A}{r_{\text{cut}}} \cdot (r_{\text{cut}}^2 - r^2) \quad r < r_{\text{cut}} \quad (2)$$

$$= 0 \quad r \geq r_{\text{cut}} \quad (3)$$

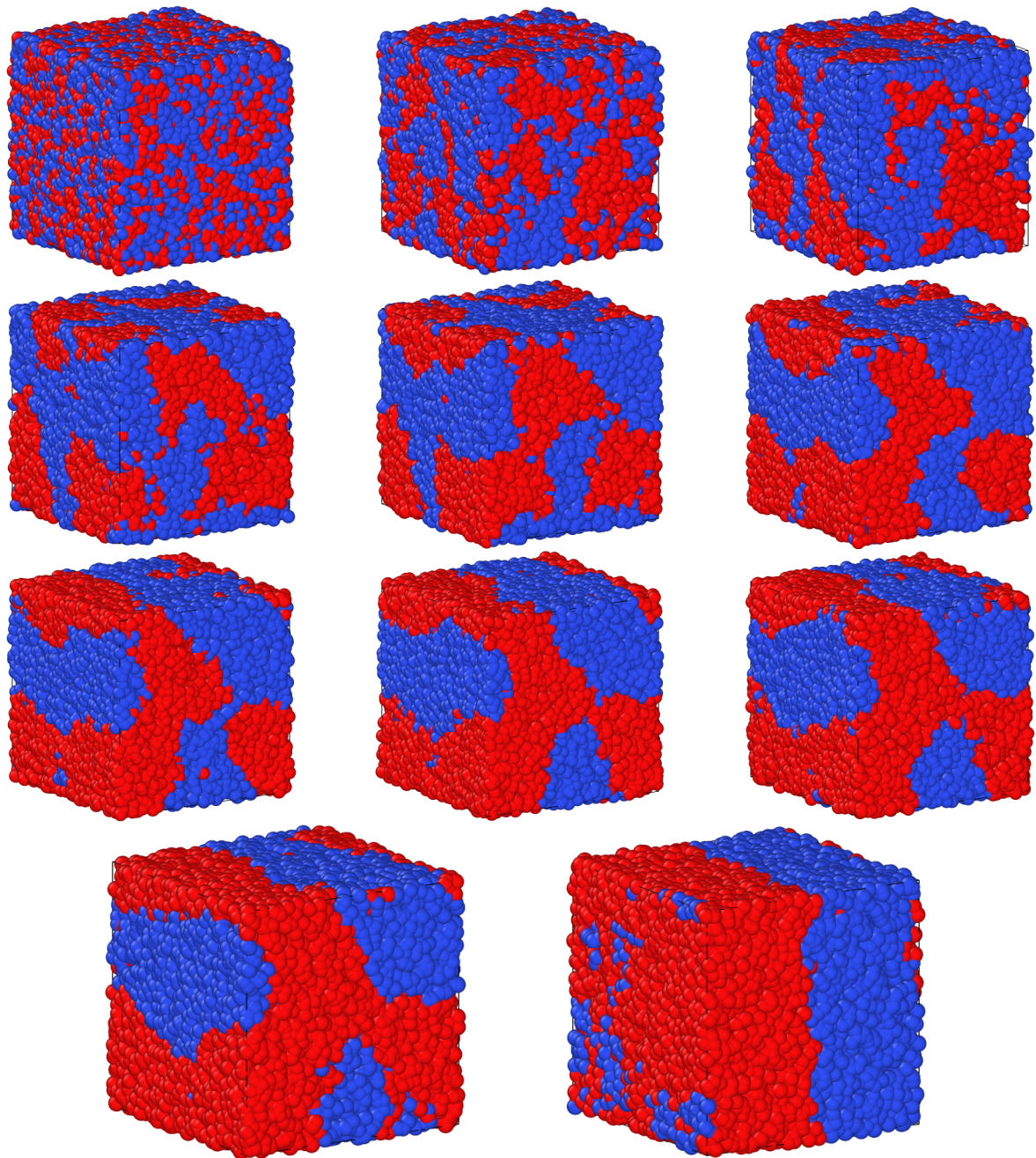
$$(4)$$

Két különböző esetben végeztem szimulációt, két darab 8 atom hosszú polimert (5 ábra), valamint két darab 32 atom hosszú polimert (5 ábra) keveredését néztem. Az ábrákon

megfigyelhető, hogy mindkét esetben két domén jelenik meg (periódikus határfeltételeket alkalmazok). Továbbá látszik az is, hogy a 32 atom hosszú polimerek esetén sokkal több idő kell amíg a 8 atom hosszú esettel teljesen azonos domének kialakulnak.



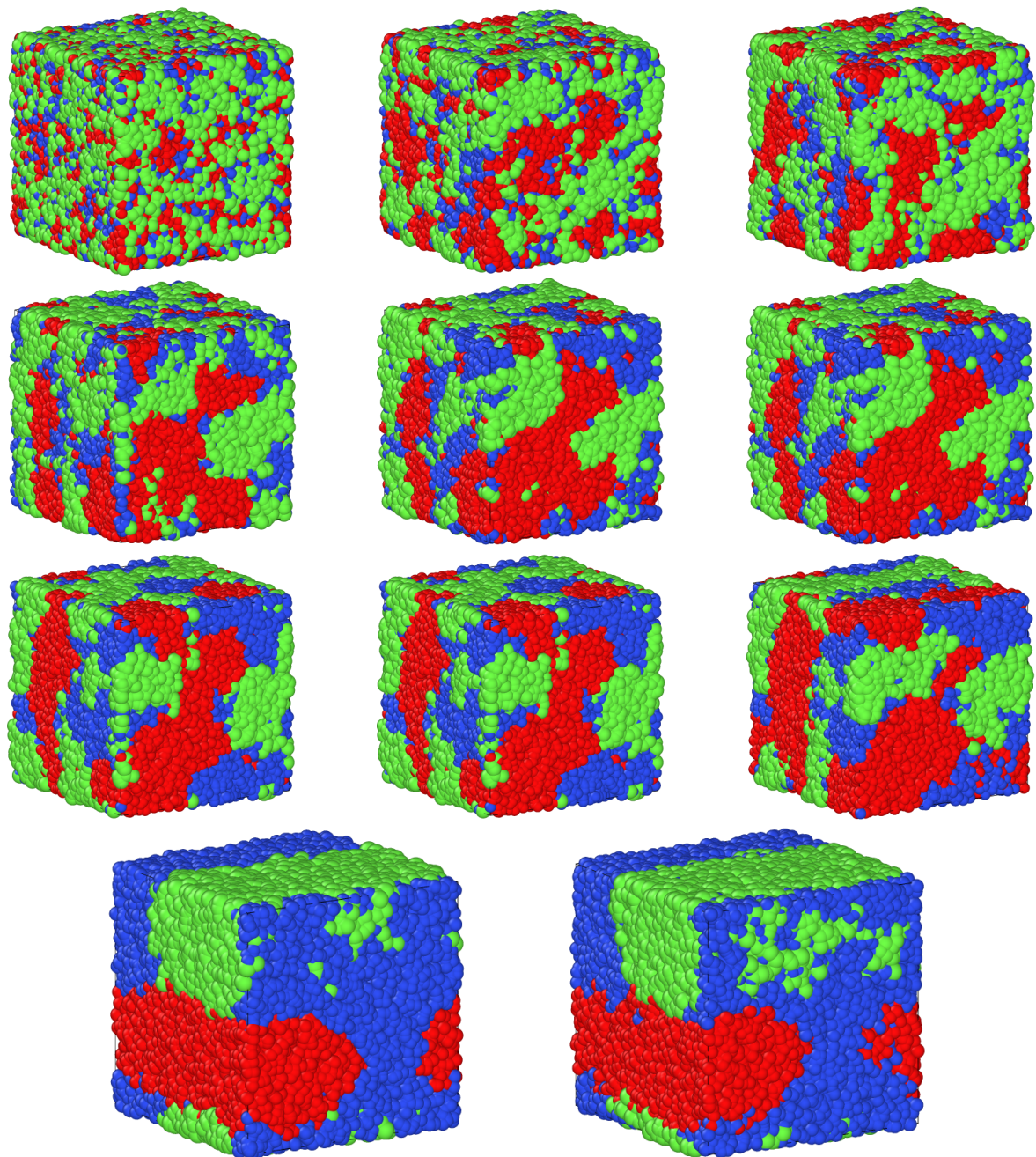
2. ábra. Kétféle polimer keveredése. 8 hosszú polimerek. Időfejlődés: balról jobbra, fentről le



3. ábra. Kétféle polimer keveredése. 32 hosszú polimerek. Időfejlődés: balról jobbra, fentről le

6. Háromféle, azonos hosszú polimer keveredése

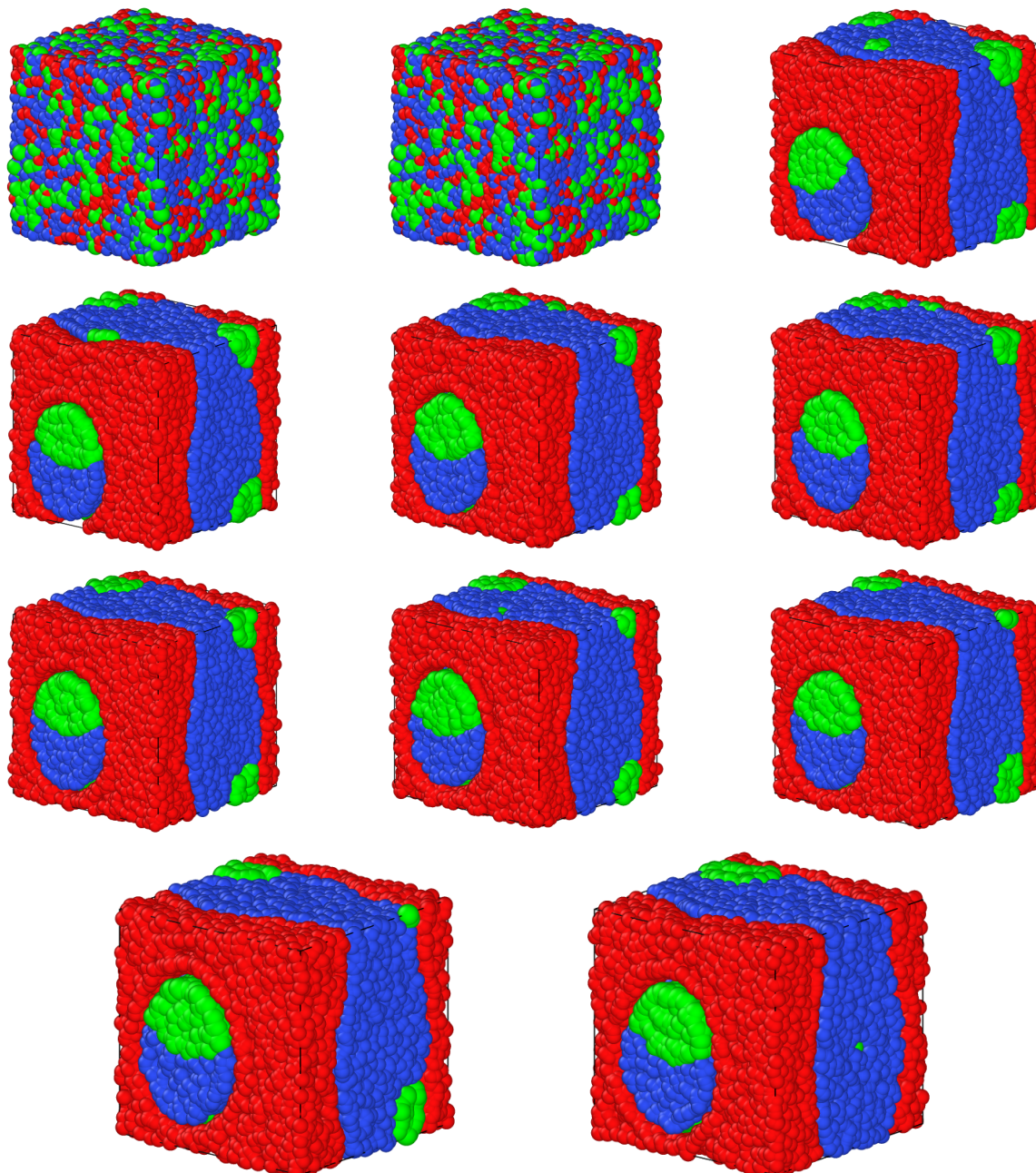
Az előző esetet kiegészítve 3 féle polimert raktam össze. A különböző atomok különböző módon hatnak kölcsön ugyanolyan típusú atommal és a más típusú atomokkal. A harmonikus kötő potenciálok azonosak, tehát csak a DPD erők különböztetik meg a különböző féle polimereket. A 6 ábra szemlélteti, hogy az előző esethez hasonlóan itt is 3 nagy egyszerű alakú domén jelenik meg.



4. ábra. Háromféle polimer keveredése. 32 hosszú polimerek. Időfejlődés: balról jobbra, fentről le

7. Háromféle, különböző hosszú polimer keveredése

Az előző eseten tovább menve vizsgáltam, hogy mit történik, ha különböző hosszú polimereket rakok össze. A 8 ábrán láthatóan ebben az esetben, egy bonyolultabb doménszerkezet alakul ki.



5. ábra. Háromféle polimer keveredése. 32,16,8 hosszú polimerek. Időfejlődés: balról jobbra, fentről le

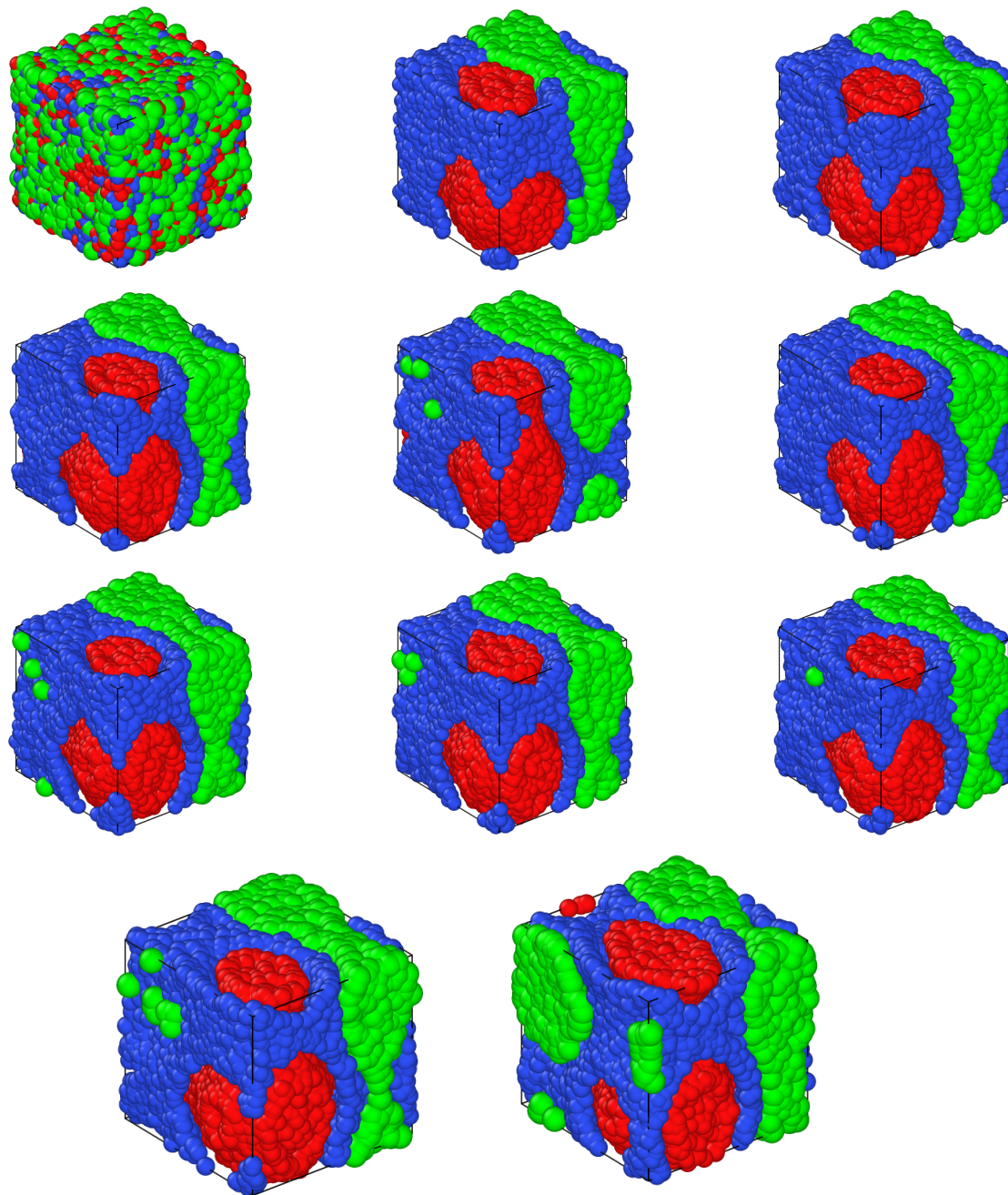
8. Háromféle, különböző hosszú polimer keveredése külső potenciálban

Az előző fejezet képest itt bevezettem egy extra külső potenciált. A külső potenciált a `hoomd.md.external` modul segítségével lehet bevezetni. Én egyszerű, periodikus potenciált választottam, amelynek alakja:

$$V(\vec{r}) = A \cdot \tanh \left[\frac{1}{2\pi p w} \cos \left(p \vec{b}_i \cdot \vec{r} \right) \right], \quad (5)$$

és a különböző polimerekre különböző paramétereket használtam.

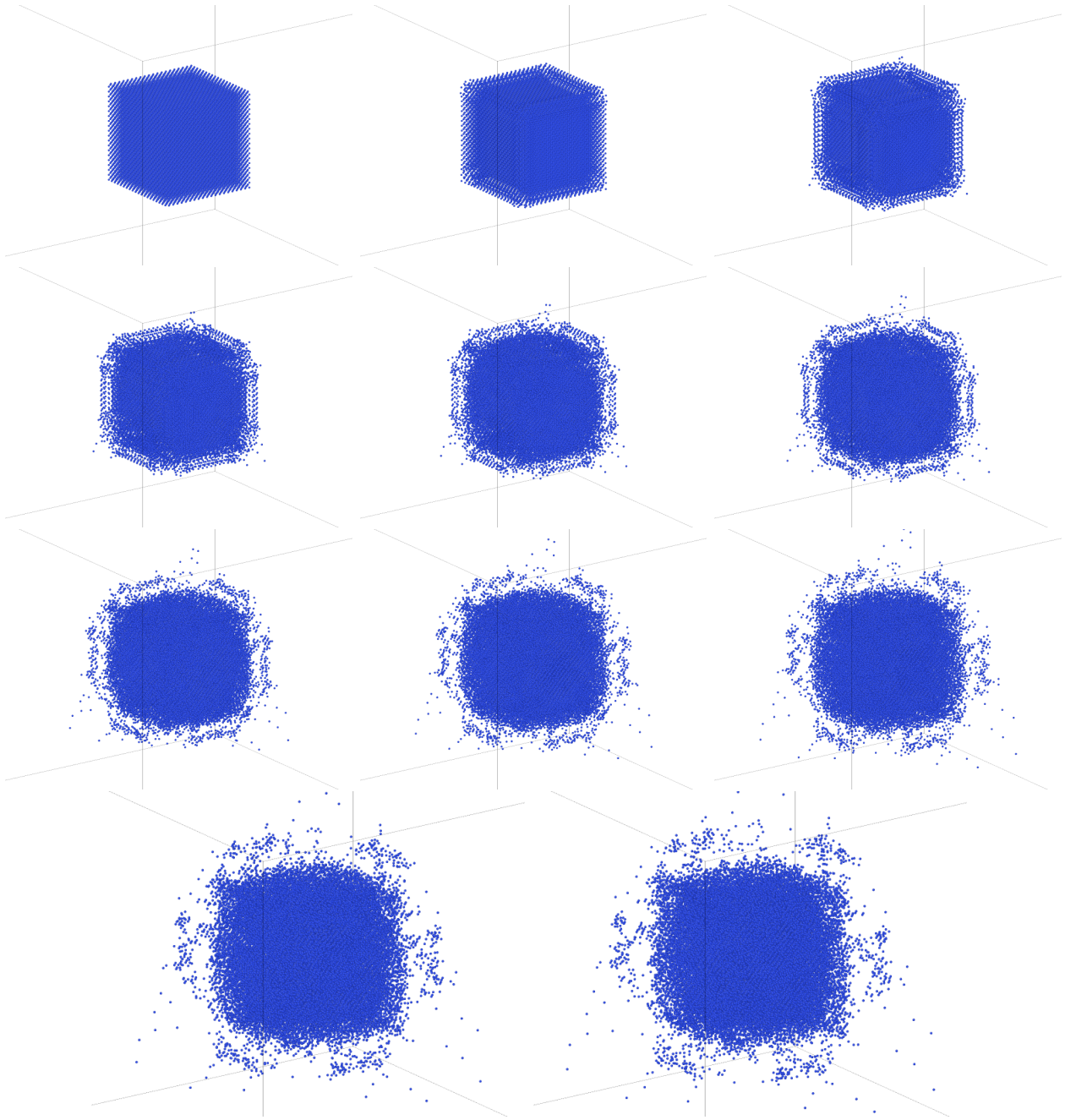
Az eredményeket a 8 ábra szemlélteti. Az előzőekhez képest itt sokkal érdekesebb domén-szerkezet alakult ki.



6. ábra. Háromféle polimer keveredése külső potenciálban. 8 hosszú polimerek. Időfejlődés: balról jobbra, fentről le

9. Argon olvadása

Vizsgáltam az Argon olvadását is. Itt kiindulásként FCC rácsba helyeztem el az Argon atomokat, majd beraktam az olvadás pontra beállított tartályban, így a kristályos Argon elkezd olvadni. Az eredményeket a 9 ábra szemlélteti. Látható, hogy a hőmérséklet hatására a kristályszerkezet fellazul, és gömb formát vesz fel, melyben az atomok lazán kötöttek. Továbbá megfigyelhető, hogy a gömbnek a széle diffúz, amely azt mutatja, hogy a szélén már párolognak az atomok.



7. ábra. Argon olvadása. Időfejlődés: balról jobbra, fentről le