

Simulações bidimensionais de polímeros e proteínas

Antônio G. Cunha Netto¹ e Álvaro A. Caparica²
agcnetto@yahoo.com.br caparica@if.ufg.br

INSTITUTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

Palavras-chave: Monte Carlo, self-avoiding walk, polímeros, Theta-point

Resumo

Utilizando simulações computacionais trabalhamos a técnica “Simple Sampling” para a obtenção do “self-avoiding walk”, usado na modelagem de polímeros em solução. Para uma melhor representação da interação entre polímero-solvente, implementamos o algoritmo desenvolvido por Metropolis, onde consideramos uma energia de interação entre os vizinhos mais próximos não consecutivos da cadeia. A implementação do algoritmo de Metropolis é feita utilizando a técnica do “Importance Sampling”, onde as contribuições no equilíbrio são ponderadas pelo fator de Boltzmann. Com isso, obtivemos médias para a energia e distância quadrática, obtendo também o coeficiente ν e a temperatura Θ da transição “coil-globule”.

Objetivos

Estudar o “self-avoiding walk” (SAW) no caso bidimensional determinando a distância média quadrática para diferentes tamanhos de polímeros podendo, com isto, determinar o “exponente de Flory” ν , dado pela relação $\langle R_{ee}^2 \rangle \approx N^{2\nu}$. Pretendemos também aplicar o algoritmo desenvolvido por Metropolis (que gera estados com probabilidade proporcional ao fator de Boltzmann) no SAW, através da implementação de interações entre os vizinhos mais próximos de cada monômero (esta energia é calculada para os vizinhos que distam de uma unidade do monômero em análise).

Metodologia

Desenvolvemos o “self-avoiding walk” descrito anteriormente utilizando como ferramenta a linguagem de programação FORTRAN, devido ao fácil acesso e sua praticidade. Todo nosso trabalho vem sendo realizado no sistema operacional LINUX, pois ele apresenta uma série de vantagens sobre outros programas, tais como: menor tempo de CPU, maior segurança no arquivamento de informações, etc.

Resultados e discussão

Em nosso trabalho tratamos de polímeros físicos, sem especificar os tipos de átomos da cadeia, onde simulamos a forma e a interação com o solvente, através de condições impostas sobre os monômeros da cadeia.

Na representação do polímero, o modelo usado é o “self-avoiding walk” (caminho auto-excludente) que descreve o chamado “excluded volume” que prediz que dois monômeros não podem ocupar o mesmo sítio da rede no mesmo instante. Evoluímos o polímero através do método da reptação, também chamado de “slithering snake” (cobra rastejante), que faz com que

¹Aluno

²Orientador

cada monômero acrescido em uma extremidade da cadeia implica na retirada de um monômero na outra extremidade.

Uma observável interessante para este modelo é a evolução da distância quadrática entre as extremidades com o número de iterações. Para isso estendemos o polímero no centro da rede e o deixamos evoluir com um grande número de iterações, notamos assim que o valor para a distância torna-se praticamente constante após um apreciável número de iterações, como pode ser observado na figura abaixo.

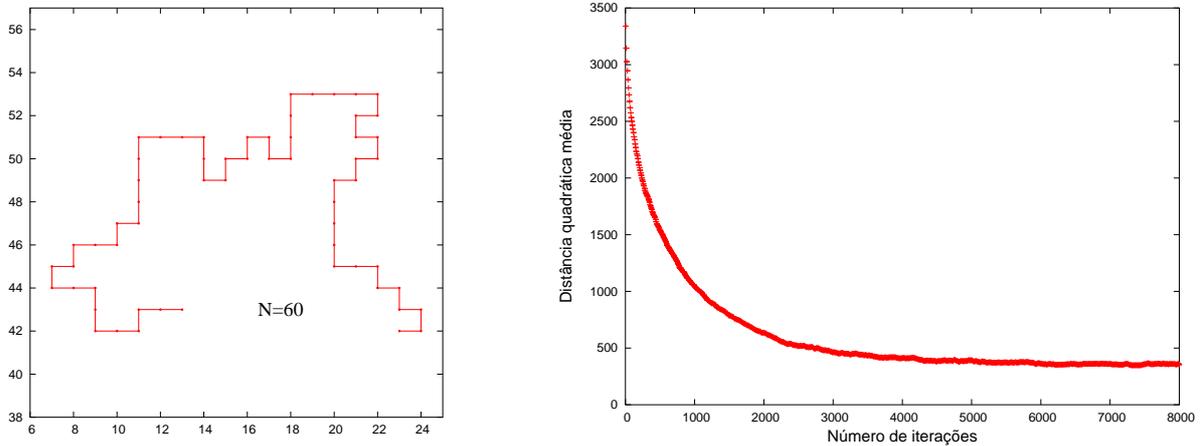


Figura 1: *Representação esquemática para o polímero no equilíbrio e gráfico para a distância quadrática média em função do números de evoluções.*

Para uma modelagem da interação do polímero com as moléculas solventes incluímos uma energia de interação entre os monômeros mais próximos não consecutivos da cadeia, que corresponde a uma aproximação do potencial de van der Walls. Essa energia de interação faz com que o polímero tenha um comportamento dependente da temperatura. Para viores elevados da energia de interação o polímero forma um “*globule*” (glóbulo) polimérico, caracterizando a presença de um mau solvente, enquanto que para baixas energias o polímero forma um inchado “*coil*” (novelo), caracterizando assim um bom solvente. A transição “*coil-globule*” é caracterizada por uma temperatura chamada de $\Theta - point$.

Os gráficos da energia média, distância quadrática e energia interna em função da temperatura são mostrados na figura 2.

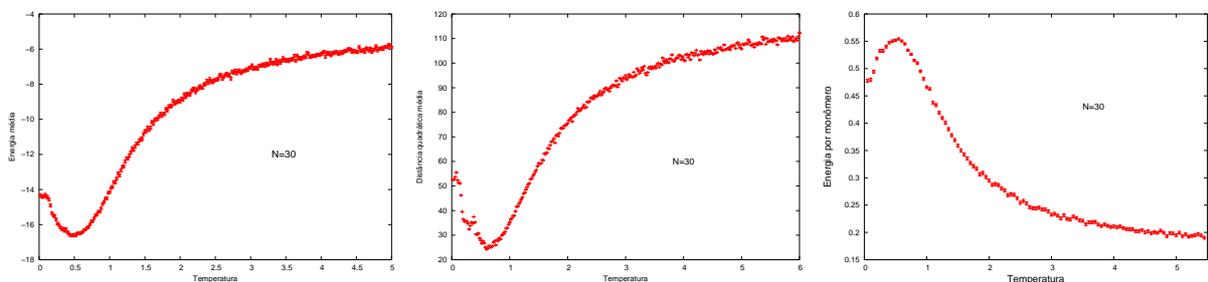


Figura 2: *Gráficos para a energia, distância quadrática e energia interna em função da temperatura para uma cadeia de 30 unidades.*

Realizando simulações para diferentes tamanhos de polímeros e plotando o gráfico da distância média em função do tamanho destes polímeros em escala logarítmica obtemos o expoente de “Flory”, dado pela metade do coeficiente angular da reta, mostrado na figura 3. Para o cálculo da

distância média utilizamos configurações referentes ao polímero nos estados de equilíbrio. Para o modelo bidimensional obtivemos para $\nu = 0,76(1)$. O valor conhecido para este expoente é de $\nu = 0,75$ [Kremer e Binder, 1988] para o caso bidimensional.

Uma estimativa para o valor do ponto Θ pode ser feita determinando para que temperatura a derivada da energia ou da distância quadrática assume o maior valor. O valor para Θ é dado pelo coeficiente linear da reta quando plotamos estas temperaturas de transição em função do inverso do tamanho das cadeias, para diferentes tamanhos de polímeros. Em nosso trabalho obtivemos $\Theta = 1.592(47)$ como mostra a figura abaixo. O valor obtido por Grassberg foi $\Theta = 1.504(5)$ [Grassberger e Hugger, 1995].

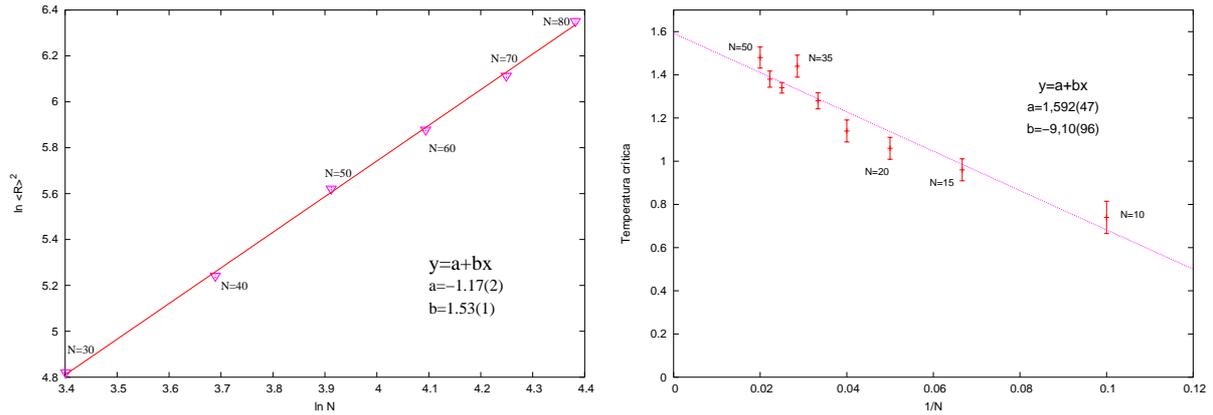


Figura 3: Gráficos utilizados na obtenção do coeficiente ν_{Flory} e Θ - point.

Conclusões

Neste trabalho estudamos modelos de polímeros através do *self-avoiding walk* utilizando a técnica da reptação, implementando no mesmo o algoritmo desenvolvido por Metropolis. A obtenção do coeficiente de linearidade ν e Θ - point foram alguns dos objetivos almejados, obtendo para os valores $\nu = 0,76(1)$ e $T_{\Theta} = 1.592(47)$. Da literatura temos que $\nu = 3/4$ [Kremer e Binder, 1988] e $T_{\Theta} = 1.504(5)$ [Grassberger e Hugger, 1995]. Um próximo passo de nosso trabalho deverá ser a implementações da técnica de Wang-Landau aos nossos modelos de polímeros com a qual esperamos poder trabalhar com redes maiores.

Acknowledgements

Agradecemos ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo financiamento.

Referências

1. K. Kremer, K. Binder: *Computacional Physics Rep.* **7**, 261 (1988).
2. P. Grassberger, R. Hegger, *J. Phys. I France* **5**, 597-606 (1995).
3. T. Prellberg, J. Krawczyk, A. Rechnitzer, cond-mat/0402549 (2004).
4. L. W. Lee, J. S. Wang, *Phys. Rev. E* **64**, 056112 (2001).
5. P. Grassberger, R. Hegger, *J. Chem. Phys.* **102**, 17 (1995).