

Sistema de simulación por dinámica molecular de interacciones entre nanotubos de carbono de pared sencilla y diferentes polímeros



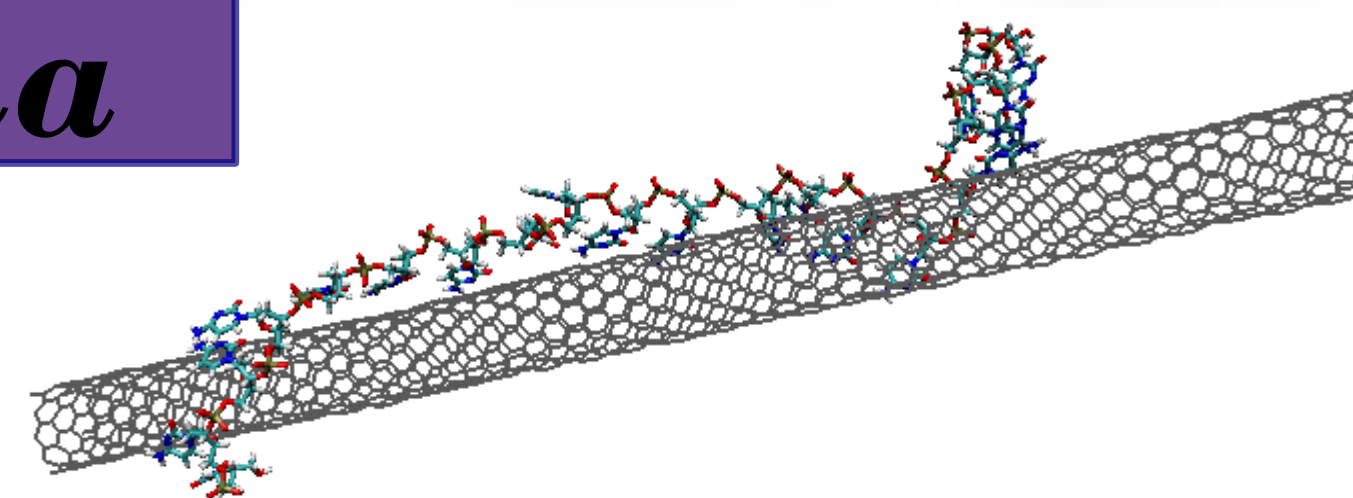
Autora: Myrna I. Merced Serrano
 Consejero: José O. Sotero Esteva
 Departamento de Matemáticas
 Universidad de Puerto Rico en Humacao



Problema

Simulaciones de Dinámica Molecular

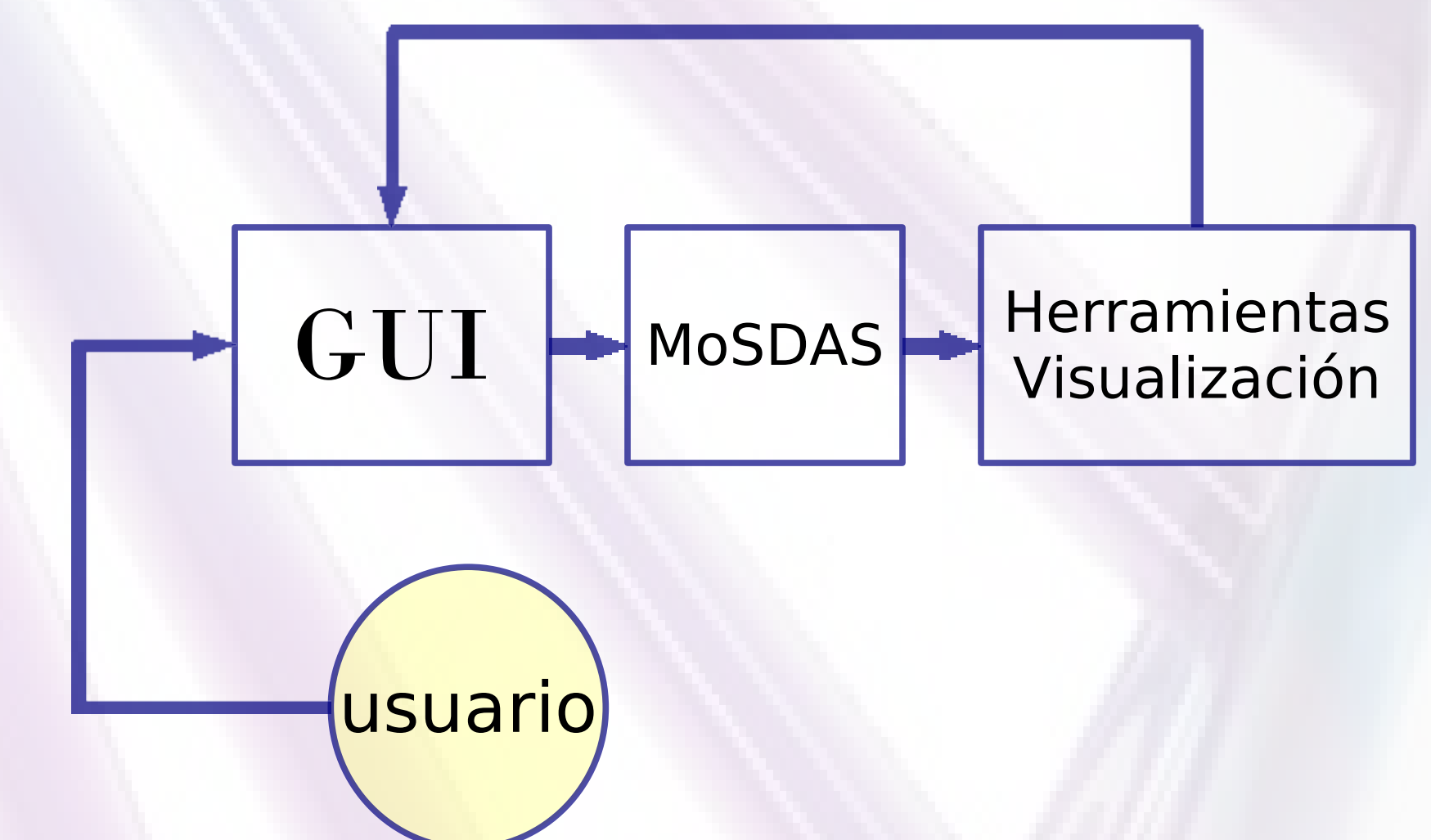
- ✓ La simulación de dinámica molecular es una técnica basada en leyes de la física que permite usar la computadora para estudiar materiales a nivel atómico.
- ✓ Los nanotubos de carbono decorados con polímeros adquieren propiedades mecánicas y eléctricas particulares.
- ✓ **Problema:** Integrar todos los métodos necesarios de la simulación de dinámica molecular entre un polímero y un nanotubo de carbono en un interfaz gráfico.



Métodos

Diseño de un prototipo de interfaz gráfico especializado para ADN:

- ✓ insumo: cantidad de monómeros, cantidad de pasos a simular y temperatura
- ✓ ejecutar el *Model building, Simulation and Data Analysis Script (MoSDAS)*
- ✓ mostrar el estado inicial de los átomos del sistema
- ✓ recoger los resultados
- ✓ mostrar en pantalla las gráficas de análisis



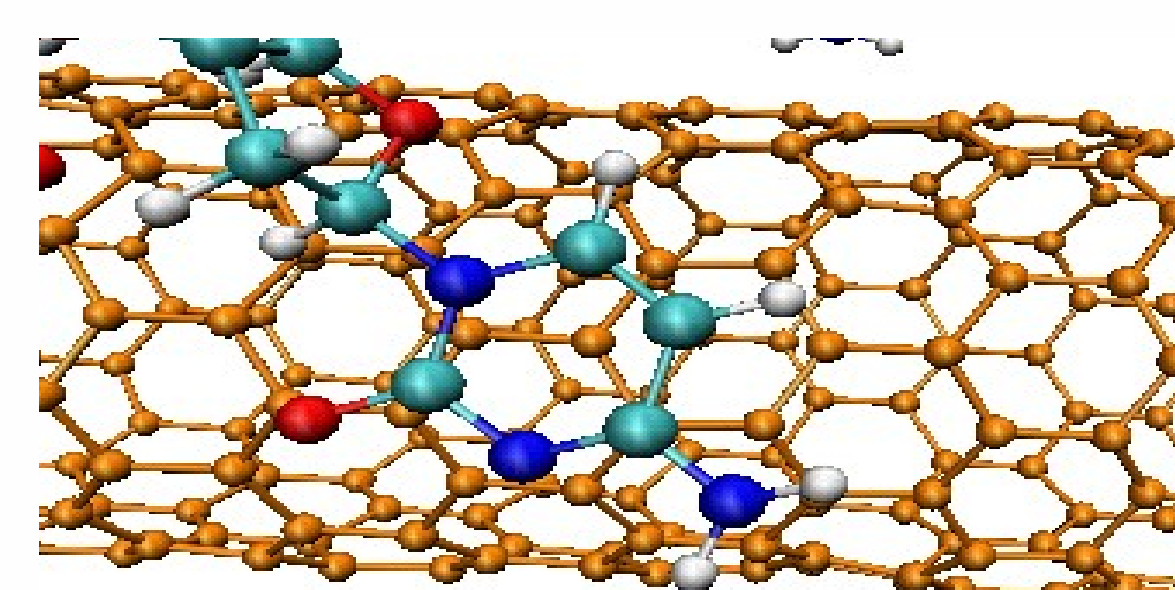
Herramientas Intergradadas

Programación

Pakete Tkinter de Python

Provee:

- ✓ menú principal
- ✓ botones de selección
- ✓ campos de insumo de texto
- ✓ botones regulares
- ✓ cargar imágenes



Programas

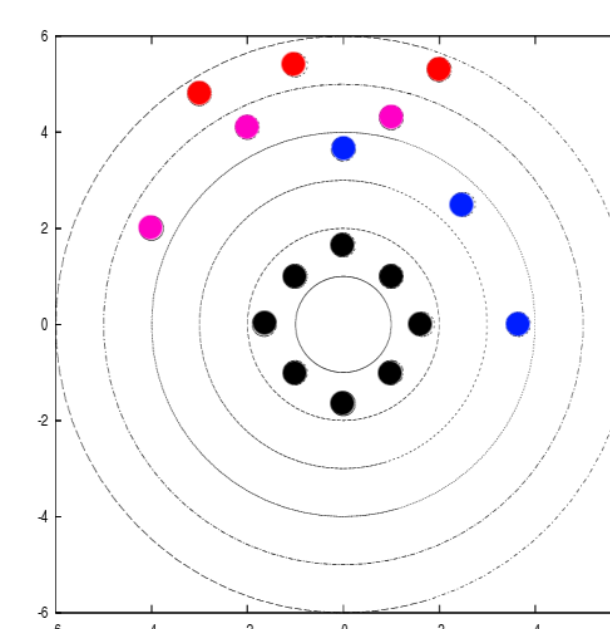
- ✓ *MoSDAS*
- ✓ distancia entre un átomo y un conjunto de átomos
- ✓ distribución radial (*GROMACS*)
- ✓ distribución de los átomos con respecto al eje-Z
- ✓ Visual Molecular Dynamics (*VMD*) se utiliza para ver la simulación.

Medidas de análisis

Distancia Punto-Conjunto

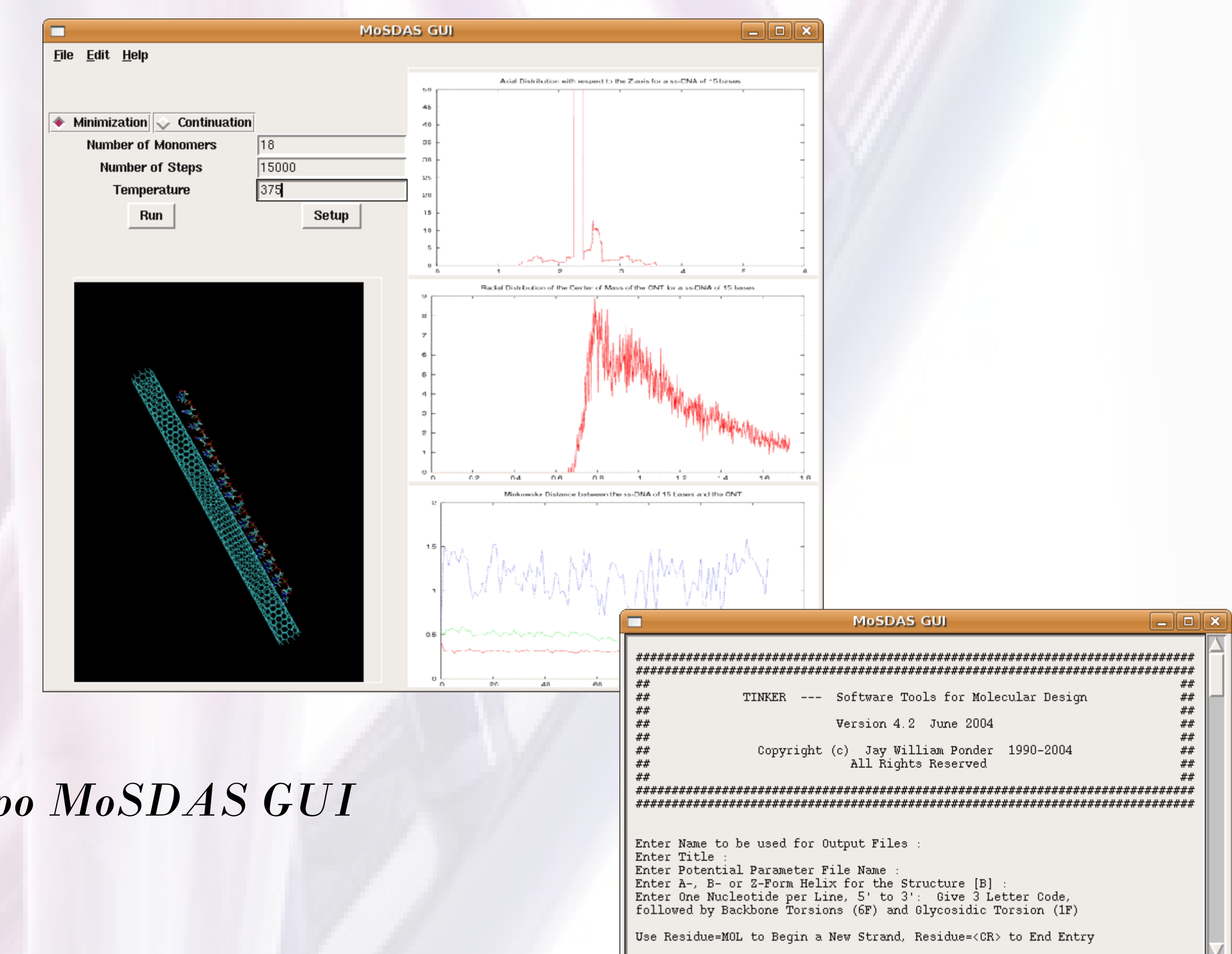
Calcula la distancia máxima, mínima y promedio entre un átomo de cada monómero y el nanotubo de carbono, durante la simulación.

Distribución de Probabilidad



Son dos funciones: de Eje (se utiliza el eje-Z como referencia) y Radial (con un grupo de átomos como referencia). Están basadas en un cilindro que se expande, en el caso de la función de Eje y en la Radial con una esfera central que se expande junto con otras esferas.

Resultado y Conclusiones



Prototipo *MoSDAS GUI*

Conclusiones

El prototipo *MoSDAS GUI* es de gran ayuda para correr *MoSDAS*. Evita el riesgo de cometer errores. Simplifica una gran parte del trabajo y nos ayuda a tener mejor organización de los datos obtenidos.

Este trabajo fue auspiciado por el proyecto *Penn-UPR Partnership for Research and Education in Materials* (NSF-DMR-353730), el programa *Humacao Undergraduate Research in Mathematics to Promote Academic Achievement* (NSA-H98230-04-C-0486), el programa *UPRH RISE* y el programa *National Science Foundation's Computer Science, Engineering and Mathematics Scholarships* (NSF-0123169).