

Moderne Simulationsmethoden in der Physik: Polymersimulationen

D. SCHMIDT

10. 12. 2009

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Allgemeines zur Polymerphysik	4
2.1	Polymergrundlagen	4
2.2	Zielsetzungen und verschiedene Polymermodelle	5
3	Simulationsmodelle	7
3.1	Anforderungen an die Modelle	7
3.2	Das Bond-Fluctuation-Modell	8
3.3	Eine Off-lattice Methode: Das Bead-Spring-Modell	10
4	Beispiel einer Simulation	14
5	Zusammenfassung	16
6	Literatur	17

1 Einleitung

Im Laufe des letzten Jahrhunderts hat sich die Überprüfung von Experiment oder Theorie durch Simulationen als drittes Standbein in der Physik etabliert. Begünstigt wurde diese Entwicklung durch die rasante Entwicklung auf dem Computermarkt, so dass mittlerweile mit handelsüblichen Rechnern schon erfolgreich komplexe Simulationen in akzeptabler Zeit durchgeführt werden können. Für hochkomplexe Simulationen (wie z.B. die Wittervorhersage) stehen Hoch- und Höchstleistungsrechner zu Verfügung, deren Leistung die der handelsüblichen Rechnern um z.T. einige tausend mal übertift. Der Erfolg der Simulationen beruht jedoch nicht nur auf der rasanten Entwicklung bei den Computern, sondern vor allem auf der Entwicklung effektiver Algorithmen.

Nachdem in der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts die Grundlagen in der Festkörperphysik gelegt waren und seitdem unvermindert von Interesse sind, wurde in der zweite Hälfte des 20. Jahrhunderts das Gebiet der biologisch motivierten Physik betreten. Die Untersuchung von biologischen Zusammenhängen auf einer physikalischen Basis, sowie die Modellbildung für biologische Prozesse ist mehr denn je in der aktuellen Forschung vertreten.

In einer Verknüpfung der zuerst genannten Simulation mit der danach angesprochenen biologischen Physik sollen in dieser Ausarbeitung einige physikalische Eigenschaften einer Polymerkette mit Hilfe von einfachen Simulationsmethoden vorgestellt werden. Dazu werden im ersten Teil die Grundlagen zur Polymerphysik erläutert, sowie die Grenzen der theoretischen Modelle genannt, um danach zwei konkrete Simulationsmethoden vorzustellen. Zuletzt wird als Beispiel eine Simulation an einem Polymer vorgestellt und mit den theoretischen Ergebnissen verglichen.

2 Allgemeines zur Polymerphysik

2.1 Polymergrundlagen

Das Wort „Polymer“ ist ein aus dem Griechischen zusammengesetztes Wort. „Poly“ ($\pi\omicron\lambda\upsilon$) bedeutet „viel“ und „meros“ ($\mu\epsilon\rho\omicron\varsigma$) ist das „Teil“. Dem Wort nach ist ein Polymer etwas, das aus vielen (gleichen) Teilen zusammengesetzt wurde.

Eine Definition des Polymeres kann zum Beispiel so aussehen:

„Ein Polymer ist eine chemische Verbindung aus Ketten- oder verzweigten Molekülen (Makromolekülen), die wiederum aus gleichen oder gleichartigen Einheiten (den sogenannten Monomeren) bestehen.“ [1]

Es gibt dabei verschiedenste Arten von Polymeren. Auch können Polymere auf verschiedene Arten unterschieden werden. So können sich zwei Polymere allein in ihrem Aufbau, d.h. in ihren Monomeren unterscheiden. Jedoch können auch Polymere mit gleichen Monomeren verschiedene physikalische und chemische Eigenschaften aufweisen (wichtig z.B. bei der Proteinfaltung).

Beispiele für verschiedene Polymere seien die einfachen Polymere Polyethylen und Polypropylen oder aber auch so komplexe Strukturen wie Plexiglas (mit dem Monomer Methylacrylsäuremethylester). Eine weitere Stoffgruppe innerhalb der Polymere wird durch die Biopolymere begründet. Biopolymere sind Polymere, die in biologischen Systemen wichtige Funktionen übernehmen. Beispiele sind hier die oben schon genannten Proteine, welche aus Aminosäuren aufgebaut sind, oder aber auch die DNA und RNA, welche aus Nukleinsäuren bestehen.

2.2 Zielsetzungen und verschiedene Polymermodelle

Im Folgenden sollen nicht die chemischen Bindungen und die daraus resultierenden Folgen im Mittelpunkt der Betrachtung stehen, sondern die statistische Polymerdynamik soll untersucht werden. Eine wichtige Kenngröße ist dabei der mittlere quadratische End-zu-End-Abstand R_E^2 .

Für die statistische Polymerdynamik ist es unwichtig, aus welchen Atomen und Molekülen die Monomere bestehen. Weiter ist es nicht von Belang, wie die Bindung zwischen zwei aufeinander folgenden Monomeren zustande kommt. Somit kann das verwendete Polymermodell das einfachste denkbar mögliche Polymermodell sein: das Polymer wird durch miteinander verbundene Punkte (oder auch Kugeln) beschrieben.



Abbildung 1: Modell des verwendeten Polymers

Um dabei komplexere Polymere zu beschreiben, können verschiedene Eigenschaften an die Monomere und ihre Verbindungsstücke vergeben werden. So können die Monomere durch harte Kugeln beschrieben werden, um eine räumliche Überschneidung des Polymers zu verhindern. Oder zwischen Monomeren können verschiedene Potentiale verschiedene attraktive oder repulsive Wechselwirkungen beschreiben. Oder die Verbindungsstücke zwischen den Monomeren können verschiedene Längen annehmen. Welche Eigenschaften an die Monomere und ihre Verbindungsstücke vergeben werden hängt jedoch von den zu simulierenden Eigenschaften ab.

Die Untersuchung statistischer Polymerdynamik einfachster Polymermodelle kann man schon im Rahmen der statistischen Physik theoretisch angegangen werden. Verschiedene dazu entwickelte Modelle sollen im Folgenden kurz vorgestellt werden.

- **Random-Walk-Modell:**
Hier befinden sich die Monomere auf den Gitterpunkten eines dreidimensionalen Gitters mit Gitterkonstante b . Ein Polymer aus N Monomeren wird dann schrittweise aufgebaut, d.h. man startet auf einem beliebigen Gitterplatz mit dem ersten Monomer und setzt das zweite Monomer auf einen beliebigen Gitterplatz der sechs angrenzenden Gitterplätze. Im nächsten Schritt setzt man das dritte Monomer auf einen Gitterplatz, der an die Position des zweiten Gitterplatzes grenzt. Dies wiederholt man, bis alle Monomere auf dem Gitter platziert wurden.
- **Freely jointed chain (FJC):** In diesem Modell betrachtet man aneinandergereihte Stäbe der Länge b . Die Verknüpfung zweier Stäbe ist völlig frei (die beiden Winkel θ und ϕ sind frei wählbar).
- **Freely rotating chain (FRC):** Wie bei der FJC wird das Polymer als aneinanderreihung von Stäben der Länge b betrachtet. Bei der FRC ist jedoch, im Gegensatz zur FJC, nur ein Winkel frei wählbar. Der Winkel zwischen der Verlängerung des vorherigen Stabes und dem betrachteten Stab (dies entspricht dem Winkel θ) wird dabei vorgegeben.

Für diese drei Modelle kann in einer relativ einfachen, aber länglichen Herleitung der mittlere quadratische End-zu-End-Abstand $R_E^2 \equiv \langle R^2 \rangle$ angegeben werden. Man erhält

$$R_E = b_{eff} \sqrt{N}, \quad (1)$$

wobei b_{eff} eine effektive Monomerlänge angibt. b_{eff} hängt nur von der Monomer- oder Bindungslänge b und einem modellspezifischen Strukturfaktor ab.

Aufgrund dieses Zusammenhangs ist auch eine theoretische Beschreibung eines Modells aus punktförmigen Monomeren, welche über Bindungen verknüpft sind, deren Bindungslänge gaußverteilt ist, möglich. Man sieht bei der Betrachtung dieser so genannten Gauss'schen Kette, dass die Forderung von gaußverteilten Bindungslängen äquivalent zu einem Modell mit Federn anstelle der starren Verbindungen ist.

Da ein reales Polymer sich nicht selbst überschneiden kann, wurde relativ schnell nach einer Methode gesucht um diese so genannte Selbstvermeidung zu erfüllen. Eine Methode wurde von Flory 1942 als ein approximatives Modell vorgeschlagen.

Spontan würde man für den mittleren quadratischen End-zu-End-Abstand R_E^2 erwarten, dass er proportional zu $N^{2\nu}$ ist, wobei $\frac{1}{2} < \nu \leq 1$. Nach einer längeren Rechnung erhält man (auch hier: gestützt durch Simulationen) einen Wert von $\nu = 0.588$.

3 Simulationsmodelle

3.1 Anforderungen an die Modelle

Das Modell soll die statistische Polymerdynamik beschreiben und nicht die Faltung eines Proteins (dafür würde man ein anderes Modell verwenden). Einerseits sollen die Wechselwirkungen und der Aufbau des Polymers möglichst genau der Wirklichkeit entsprechen. Dies würde eine Molekulardynamik-Simulation wohl am Besten erfüllen. Auf der anderen Seite besteht aber für die Berechnung nur eine endliche Rechendauer zur Verfügung, so dass ein Modell auch noch auf kurze Rechenzeiten zu optimieren ist. Eine MD-Simulation muss jedoch, wie z.B. beim Plexiglas, für jedes Monomer u.U. sehr viele Atome simulieren, die keinen oder kaum Einfluss auf die Polymerdynamik haben.

Folglich werden an das Modell die zum Teil oben schon genannten Anforderungen gestellt werden. Dazu gehört, dass das Polymer in dem Modell aus miteinander verbundene Kugeln besteht, die über variable, aber begrenzte Bindungsmöglichkeiten verbunden werden sollen. Ein weiteres Ziel ist es, die Selbstvermeidung zu erfüllen.

Im Folgenden sollen zwei Modelle zur Beschreibung statistischer Polymerdynamik vorgestellt werden. Ein Modell nutzt als Grundlage ein diskretisiertes Gitter, das andere ist ein so genanntes Off-lattice-Modell, das also ohne Diskretisierung im Raum auskommt.

3.2 Das Bond-Fluctuation-Modell

Als ein frühes Modell zur Simulation von Polymerdynamik wurde 1987 von I. Carmesin und K. Kremer das Bond-Fluctuation-Modell vorgeschlagen. Dabei liegt ein zwei- oder dreidimensionales Gitter mit Gitterkonstante a zugrunde. Die Beschreibung des Modells soll zuerst in zwei Dimensionen erfolgen.

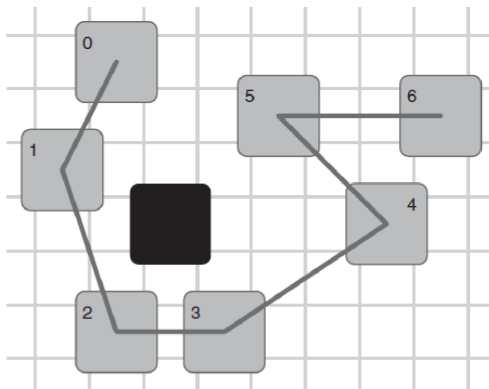


Abbildung 2: Das Bond-Fluctuation-Modell nach Carmesin und Kremer [2]

Ein Monomer wird durch eine Ansammlung von vier Gitterplätzen beschrieben. Jeder Gitterplatz kann nur einmal besetzt werden. Weiterhin ist die Bindungslänge, hier der Abstand der Mitten zweier aufeinander folgende Monomere, größer gleich $2a$ und kleiner als $4a$. Somit ist gewährleistet, dass sich das Polymer nicht überschneiden kann und die Selbstvermeidung erfüllt ist (Abbildung 3).

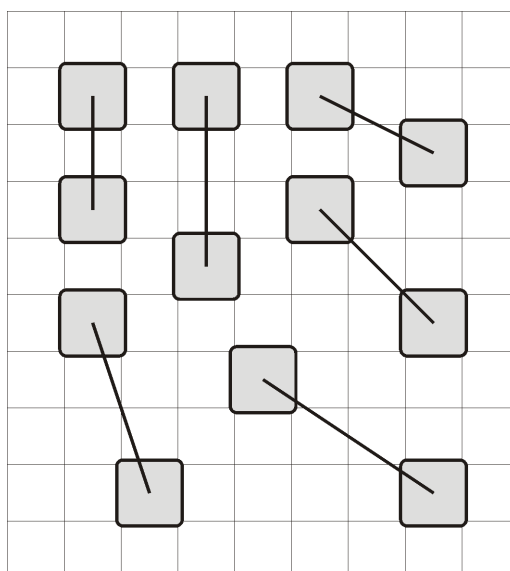


Abbildung 3: Alle möglichen Bindungslängen des Bond-Fluctuation-Modells in zwei Dimensionen

Für ein dreidimensionales Gitter verwendet man Monomere bestehend aus acht Gitterplätzen und eine maximale Bindungslänge von $\leq 10a$. Damit ist auch hier mit einfachen Mitteln gewährleistet, dass sich das Polymer nicht überschneidet.

Um nun Polymerdynamik zu untersuchen, fängt man mit einer gegebenen Anfangsbedingung für das Polymer an und verändert in jedem Zeitschritt die Konfiguration des Polymers ein wenig. Dazu wählt man zufällig ein Monomer aus und verschiebt es um einen Gitterplatz in eine beliebige Koordinatenrichtung. Die Verschiebung wird akzeptiert, wenn die Gitterplätze in die Richtung der Verschiebung nicht besetzt sind und wenn die Bindungslängen zu den benachbarten Monomeren im erlaubten Intervall bleiben. Um eine Polymerdynamik zu untersuchen, wiederholt man diesen Schritt der zufälligen Auswahl und Verschiebung einige zehntausend bis hunderttausend mal, je nach Länge des untersuchten Polymers. Um Statistik betreiben zu können muss die Berechnung der Polymerdynamik für eine ausreichend große Anzahl an Polymeren durchgeführt werden.

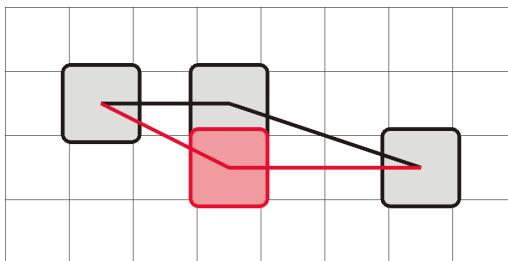


Abbildung 4: Eine mögliche Verschiebung im Bond-Fluctuation-Modell

Die Vorteile des Bond-Fluctuation-Modells liegen in der Erfüllung der Selbstvermeidung und den begrenzten Bindungslängen. Es werden also die beiden geforderten wichtigen physikalischen Eigenschaften erfüllt. Auf technischer Seite liegen die Vorteile des aufgezeigten Modells in der einfachen Implementierung bei On-lattice-Rechnungen, sowie in den äußerst kurzen Rechenzeiten für einen Einzelschritt.

Die Nachteile des Modells sind auch leicht zu finden. So können in diesem Modell Anfangszustände vorgegeben werden, die eine Polymerdynamik sehr stark einschränken oder gar verbieten. Solch ein Fall liegt z.B. vor, wenn alle Bindungslängen maximal gestreckt sind, das Polymer möglichst dicht gepackt ist und zusätzlich die Enden des Polymers ohne Bewegungsmöglichkeiten gefangen sind. Solche nicht-ergodischen Zustände, also Zustände die a priori nicht den vollen Phasenraum nutzen können, spielen auf der technischen Seite kaum eine Rolle. Dies liegt an der Seltenheit der Startkonfiguration und dem leichten Auffinden dieses atypischen Polymers. Ein weiterer und schwerwiegender Nachteil des Bond-Fluctuation-Modells liegt in der Einfachheit des Modells. So können keine zusätzlichen Wechselwirkungen zwischen den Monomeren eingebaut werden und die Bewegungsmöglichkeiten des Polymers sind durch die Diskretisierung im Raum, gekoppelt mit den wenigen erlaubten Bindungslängen, eingeschränkt.

3.3 Eine Off-lattice Methode: Das Bead-Spring-Modell

Um die physikalischen Nachteile der vorherigen Herangehensweise zu beheben soll hier noch ein weiteres Modell vorgestellt werden. Das Modell kommt ohne eine Diskretisierung im Raum aus, d.h. es verwendet kein Gitter als Grundlage (off-lattice). Der Aufbau des Modells soll kurz beschrieben werden:

Die Verbindung zwischen zwei Monomeren wird durch „Federn“ hergestellt. Zu der Art der Federn wird im Folgenden noch näher eingegangen. Zudem werden die Monomerwechselwirkungen über den Einbau von Potentialen implementiert.

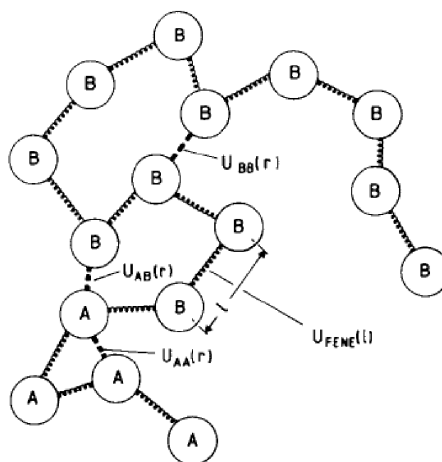


Abbildung 5: Ein anschauliches Modell einer Off-lattice-Methode

Bevor auf die verschiedenen Potentiale für die Federn und die Monomerwechselwirkungen eingegangen wird, soll zuerst auf relativ abstrakte Weise die Vorgehensweise zur Simulation der Polymerdynamik beschrieben werden. Dazu wählt man zufällig ein Monomer aus und verschiebt es um eine zufällige Länge aus dem Intervall $[-\frac{\Delta}{2}, \frac{\Delta}{2}]$ in jede Koordinatenrichtung. Nach der Verschiebung wird die Änderung der Gesamtenergie ΔU der neuen Konfiguration berechnet. Anschließend wird bestimmt, ob die Verschiebung akzeptiert wird, oder nicht. Die Akzeptanz erfolgt mit der Wahrscheinlichkeit

$$\min[1; e^{-\beta\Delta U}], \quad (2)$$

wobei $\beta = (k_B T)^{-1}$. Dieser Vorgang wird als Metropolis-Monte-Carlo-Methode bezeichnet. Um einerseits eine nicht-verschwindende Polymerdynamik, andererseits aber auch eine nicht zu geringe Akzeptanzrate zu erhalten, wird Δ typischerweise so gewählt, dass etwa die Hälfte der Verschiebungen akzeptiert werden.

Im Folgenden werden verschiedene, aber natürlich nicht alle Möglichkeiten für die Potentiale beleuchtet:

- Das Feder-Potential:

Für das Potential zur Verbindung der Monomeren kann einerseits einfach ein harmonisches Potential, andererseits aber auch ein so genanntes FENE-Potential verwendet werden. Ein harmonisches Potential beschreibt ein lineares Kraftgesetz und kommt deshalb einer Beschreibung mit Federn im hooke'schen Bereich am nächsten. Ein harmonisches Potential hat jedoch den Nachteil, dass der Bindungsabstand prinzipiell bedeutend größer werden kann, als es noch mit der Realität zu vereinbaren wäre. Desweiteren wird ein Polymer, dessen Verbindungen über ein harmonisches Potential beschrieben werden, sobald es einmal aus der Gleichgewichtslage ausgelenkt war, stets in Schwingung bleiben und nicht wieder in einen stationären Zustand zurück gehen. Aus diesem Grund wurde das FENE-Potential (finitely extensible nonlinear elastic potential) eingeführt und ist noch immer erfolgreich. Das FENE-Potential ist ein anharmonisches Potential und hat die Form

$$U_{FENE}(l) = -\frac{k}{2}\Delta l^2 \ln\left(1 - \frac{(l - l_0)^2}{\Delta l^2}\right). \quad (3)$$

Durch den Logarithmus steigt einerseits die Rechenzeit, andererseits begrenzt das FENE-Potential die Bindungslänge (bei kleinen Verschiebungen Δ , sonst ist eine zusätzliche Abfrage zur Bindungslänge notwendig) und führt durch die Anharmonizität auf einen stationären Zustand.

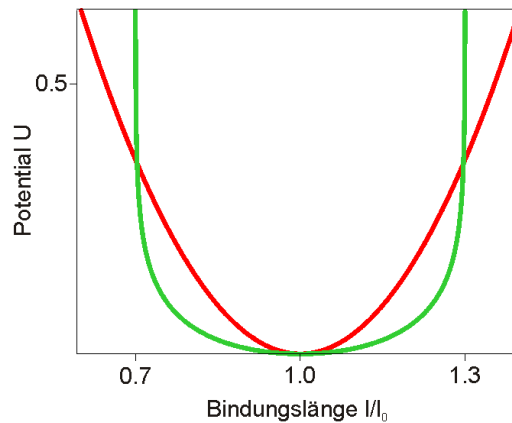


Abbildung 6: Zwei mögliche Feder-Potentiale (rot: harmonisches Potential, grün: FENE-Potential)

- Wechselwirkungen zwischen Monomeren:

Die Wechselwirkungen zwischen den Monomeren können prinzipiell vielfältiger Natur sein. Es sollen nur wenige, typische Beispiele aufgezeigt werden. Treten mehrere Monomerarten auf und sind die Monomere elektrisch geladen, dann kann als Wechselwirkungspotential zwischen den Monomeren das bekannte Coulomb-Potential gewählt werden.

Für elektrisch neutrale Monomere gibt es mehrere verwendete Potentiale. Soweit man nicht die Kräfte bestimmen muss, bietet sich für die Monomere ein hartes Kugelschalen Potential

$$U_{Kugel}(r) = \begin{cases} 0 & \text{falls } r \leq r_0 \\ \infty & \text{falls } r > r_0 \end{cases} \quad (4)$$

für jedes Monomer an. Ist aber eine Betrachtung von Kräften $F = -\nabla U$ nötig, dann nimmt man lieber ein Potential, das stetig und differenzierbar ist.

Ein solches Potential ist z.B. das Lennard-Jones-Potential

$$U_{LJ}(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right), \quad (5)$$

oder falls keinerlei attraktive Wechselwirkung zwischen den Monomeren erwünscht wird, das modifizierte WCA-Potential (nach Weeks-Chandlers-Anderson)

$$U_{WCA}(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) + \epsilon & \text{falls } r \leq r_0 \\ 0 & \text{falls } r > r_0 \end{cases} \quad (6)$$

Das WCA-Potential ist ein nach oben verschobenes Lennard-Jones-Potential, dessen Minimum abgeschnitten wird.

Eine weiterer Ersatz für ein Lennard-Jones-Potential ist z.B. das Morse-Potential.

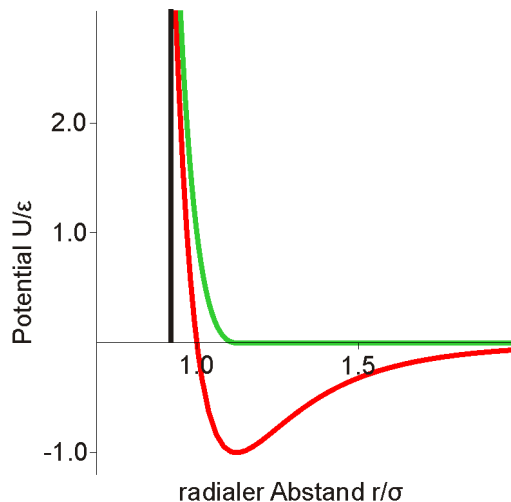


Abbildung 7: Verschiedene Potentiale für die Monomerwechselwirkungen (schwarz: hartes Kugelschalenmodell, rot: Lennard-Jones-Potential, grün: WCA-Potential)

Die Vorteile des vorgestellten Modells liegen vor allem in der freien Gestaltungsmöglichkeit bei den Wechselwirkungen. Dadurch, dass die Wechselwirkungen über Potentiale eingebaut werden, können sie auch beliebig gewählt werden. Desweiteren sind bei der Wahl des FENE-Potentials für die Federn die Bindungslängen begrenzt. Wählt man die maximale Bindungslänge und den Kugelradius der Monomere geeignet, ist auch die Selbstvermeidung erfüllt. Zuletzt handelt es sich um ein ergodisches Modell, d.h. das Phasenraumvolumen eines Polymers ist in diesem Modell vollständig zugänglich.

Die Nachteile des Modells liegen zuerst in der Problematik geeigneter Parameter. Ist die maximale Verschiebung eines Monomers pro Schritt Δ zu groß, so werden aufgrund von großen Gesamtenergieänderungen und der Überschreitung der maximalen Bindungslänge im FENE-Potential nur wenige Schritte akzeptiert. Ist Δ dagegen zu klein, so ist die Polymerdynamik nicht sehr stark ausgeprägt. In der Praxis hat sich für diesen Parameter eine Akzeptanzrate von 50% bewährt. Ein viel gewichtiger Nachteil dieser Methode ist die Rechenzeit für das Modell. Dadurch, dass es sich um eine Monte-Carlo-Methode handelt sind für kleine statistische Fehler viele Rechenschritte notwendig. Hinzu kommt, dass auch die Rechenzeit eines Einzelschritts relativ groß ist, da zum einen ein Logarithmus ausgewertet, andererseits aber auch das Potential zu allen anderen Monomeren bestimmt werden muss.

4 Beispiel einer Simulation

Als Beispiel für die Simulation eines Polymers mit Untersuchung des statistischen Polymerdynamik wird die Untersuchung von Binder und Milchev gezeigt [3]:

Gesucht wird die Übergangstemperatur eines Polymers zwischen einer kugelförmigen Gestalt und einem entfalteten Polymer.

Als Modell für das Polymer wird das oben beschriebene Off-lattice-Modell mit einer Monomersorte verwendet. Die Potentiale sollen für die Federn das anharmonische FENE-Potential und als Wechselwirkung zwischen den Monomeren wird ein Morse-Potential

$$U_{Morse} = \epsilon \left(e^{-2\alpha(r-r_{min})} - 2e^{-\alpha(r-r_{min})} \right) \quad (7)$$

angenommen.

Ist die thermische Anregung des Polymers zu gering, d.h. liegt die Temperatur des Systems unter der Übergangstemperatur θ , so werden die N Monomere sich in einen stationären Zustand so anordnen, dass der Abstand zwischen zwei Monomeren gegen r_{min} geht. Das Polymer nimmt also eine Kugelgestalt an. Für eine Kugelgestalt wird der mittlere quadratische End-zu-End-Abstand $R_E^2 \propto N^{2/3}$, da die Monomeranzahl proportional zum Volumen ist.

Ist die thermische Anregung dagegen groß genug, um die Monomere aus der „Energiesenke“ ϵ zu befreien, ist also $T > \theta$, dann wird sich das Polymer entfalten und einen mittleren quadratischen End-zu-End-Abstand gemäß dem Flory-Theorem (Betrachtung eines statistisch verteilten Polymers mit Selbstvermeidung) $R_E^2 \propto N^{2\nu}$ mit $\nu = 0.588$ annehmen.

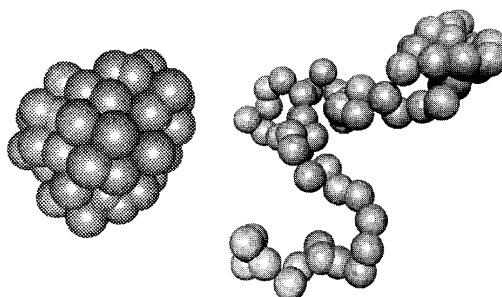


Abbildung 8: Das Polymer nach 655.000 Monte-Carlo Schritten bei einer Temperatur unter (links), bzw. über (rechts) der Übergangstemperatur θ

Untersucht man nun mehrere Polymere mit unterschiedlicher Monomeranzahl N (hier: $N = 32, 64, 128$) und trägt $\frac{1}{N}R_E^2$ über der Temperatur T auf, so werden sich die Kurven der verschiedenen Polymere bei der Übergangstemperatur θ schneiden. Dies liegt daran, dass $\frac{1}{N}R_E^2$ unterhalb der Übergangstemperatur θ proportional zu $N^{-1/3}$, überhalb der Übergangstemperatur jedoch proportional zu $N^{0.176}$ ist.

Die Ergebnisse der Simulation sind in den folgenden Bildern aufgezeigt:

Die Illustration der Polymere erfolgte nach 655.000 Monte-Carlo Schritten (Abbildung 8). Dem Schaubild kann leicht die Übergangstemperatur $\theta \approx 0.6$ entnommen werden (Abbildung 9).

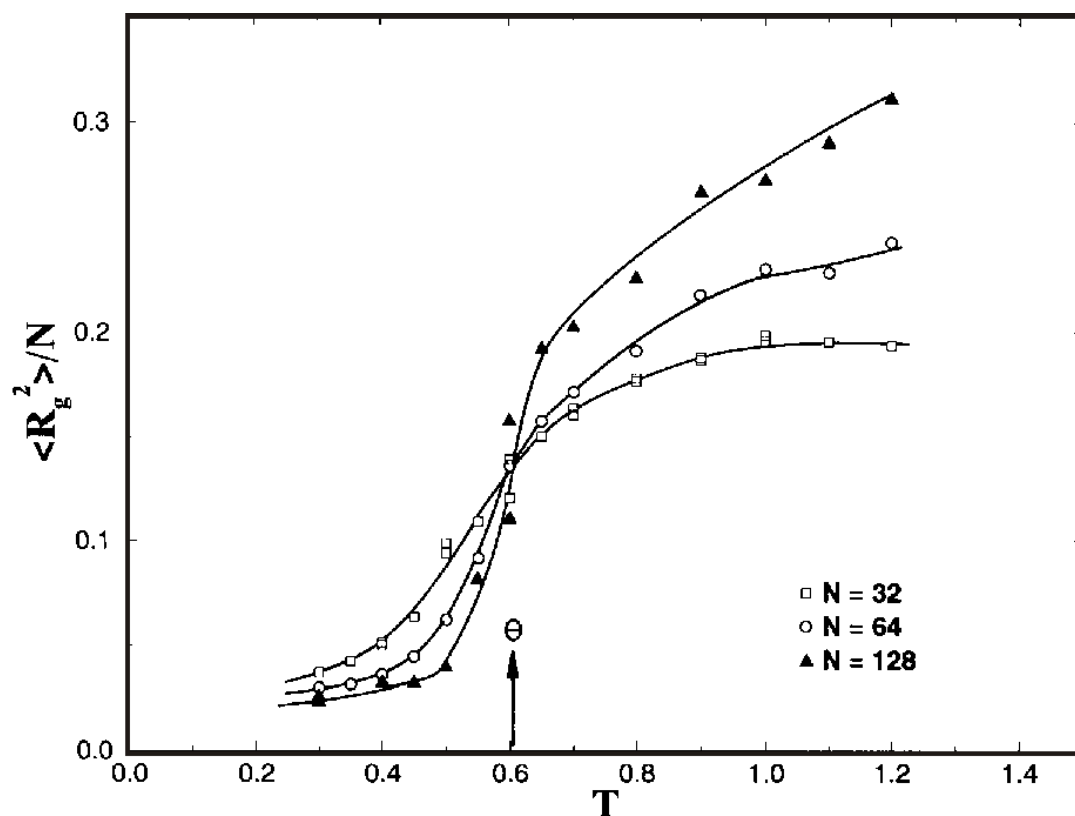


Abbildung 9: Das Ergebnis der Simulation. Am Schnittpunkt der Kurven liegt die Übergangstemperatur θ .

5 Zusammenfassung

Die Untersuchung von Polymeren ist in mehreren Bereichen, wie der Biologie, Medizin und Physik, aktueller Forschungsgegenstand. In der Physik sind vor allem die statistischen Polymereigenschaften von Belang.

Simulationen bilden seit einigen Jahren das dritte Standbein der Physik. Insbesondere eignen sich Simulationen sehr gut für die Untersuchung von statistischer Polymerdynamik. Die Schwierigkeiten liegen, wie häufig der Fall, in der richtigen Wahl der Vereinfachungen. Die Wahl der Vereinfachungen hat immensen Einfluss auf die Anwendbarkeit des Modells und natürlich auch auf die Rechenzeit.

Die vorgestellten Modelle sind exemplarisch ausgewählt worden. Natürlich können auch diverse andere Modelle für die Untersuchung von statistischer Polymerdynamik verwendet werden. Das Bond-Fluctuation-Modell ist ein On-lattice-Modell, also ein Polymermodell, das auf einem Gitter diskretisiert ist. Die Vorteile liegen in der schnellen Rechenzeit und den guten Implementierungsmöglichkeiten, wenn schon auf einem Gitter gerechnet wird. Die Nachteile des Modells liegen vor allem in der Einfachheit des Modells.

Um die Nachteile zu eliminieren und als Beispiel für ein Off-lattice-Modell, wurde das Bead-spring-Modell vorgestellt. Die Vorteile des Modells liegen insbesondere in der freien Gestaltungsmöglichkeit bezüglich der Wechselwirkungspotentiale. Die Nachteile liegen vor allem an den komplizierten und deshalb oft langen Recheneinzelschritten. Mit ansteigender Rechenleistung der Computer wird dies jedoch immer weniger wichtig.

6 Literatur

- [1] <http://de.wikipedia.org/wiki/>
mit den Unterkapiteln Polymer, Biopolymer, Aminosäure, Protein (Stand:
10.12.2009)
- [2] Carmesin, I., Kremer, K., *Macromolecules* 1988, 21, 2819-2823
- [3] Binder, K., Milchev, A., *J. Comput. Aided Mater. Des.* 2002, 9, 33-74
- [4] Slater, G.W., Holm, C., et al., *Electrophoresis* 2009, 30, 792-818
- [5] Baumgärtner A., Binder, K., *J.Chem.Phys.* 1979, 71(6), 2541-2545
- [6] Vorlesungsmitschriebe aus der Vorlesung „Physik der weichen und biologischen Ma-
terie“ von U. Seifert im SS 09, Universität Stuttgart