

# Minimização do Potencial LJ

## Clusters de Partículas

---

Breno Montanha, Lucas, Venâncio

Física Computacional

- 1 **Introdução**
- 2 **Metodologia**
- 3 **Algoritmos Implementados**
- 4 **Visualização**
- 5 **Resultados**
- 6 **Conclusão**

## Contextualização:

- Sistemas físicos tendem naturalmente ao estado de menor energia (mínimo global).
- Estamos simulando um cluster de  $N = 50$  átomos de Argônio.

## O Desafio:

- A superfície de energia potencial possui muitos **mínimos locais**.
- Métodos simples de descida podem ficar presos nessas armadilhas, não encontrando a estrutura cristalina mais estável.

Para validar nossa simulação, utilizamos o **Cambridge Cluster Database (CCD)**, referência mundial para mínimos globais de Lennard-Jones (Wales & Doye). Para  $N = 50$ , a estrutura mais estável conhecida (Northby) possui simetria  $C_s$ .

## Energia Mínima Teórica

Em unidades reduzidas:

$$E_{CCD} = -244.549926 \epsilon$$

Convertendo para Argônio ( $\epsilon = 0.0104$  eV):

$$E_{teorico} \approx -2.5433 \text{ eV}$$

*Nosso objetivo é aproximar a energia final deste valor.*

As coordenadas de  $N$  partículas são geradas de maneira aleatória dentro de uma caixa de dimensões  $X, Y, Z$  (Å) no espaço 3D.

## **Critério de Exclusão (Do código):**

- Para evitar sobreposição nuclear (energia infinita), verificamos a distância a cada inserção.
- Se  $d^2 < r_{min}^2$ , a posição é rejeitada e sorteada novamente.

# Potencial de Lennard-Jones

O potencial em questão é o de Lennard-Jones que tem a seguinte estrutura matemática:

$$U(r) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

E a força gerada por ele é dada pela expressão (Gradiente negativo):

$$F_i(r) = \sum_{j=1, j \neq i}^N 24\epsilon \left[ 2 \left( \frac{\sigma^{12}}{r_{ij}^{13}} \right) - \left( \frac{\sigma^6}{r_{ij}^7} \right) \right] \quad (2)$$

No átomo de argônio:  $\epsilon = 0.0104$  eV e  $\sigma = 3.405$  Å.

# Método do Gradiente (Steepest Descent)

A minimização é feita movendo cada partícula na direção da força resultante:

$$\vec{r}_i^{(k+1)} = \vec{r}_i^{(k)} + h \vec{F}_i$$

- $h$  controla a estabilidade do método.
- Passos grandes  $\rightarrow$  instabilidade.
- Passos pequenos  $\rightarrow$  convergência lenta.

- Inspirado no resfriamento térmico de sólidos.
- Estados de maior energia podem ser aceitos com probabilidade:

$$P = e^{-\Delta E/T}$$

- Temperatura alta  $\rightarrow$  exploração do espaço.
- Temperatura baixa  $\rightarrow$  refinamento local.



Utilizamos dois métodos em sequência:

## 1. **Simulated Annealing (SA):**

- Fase de "aquecimento" e resfriamento lento.
- Aceita aumentos de energia (Critério de Metropolis) para escapar de mínimos locais.

## 2. **Steepest Descent (Gradiente):**

- Fase de refinamento.
- Move as partículas na direção exata da força até que  $F_{max} < 0.01 \text{ eV/\AA}$ .

# Visualização da Estrutura Final

A visualização da trajetória e da estrutura final foi realizada utilizando o software **Jmol**.



Figure: Imagem do Software Jmol

 **Jmol — Visualização de Estruturas Moleculares**

# Evolução da Minimização

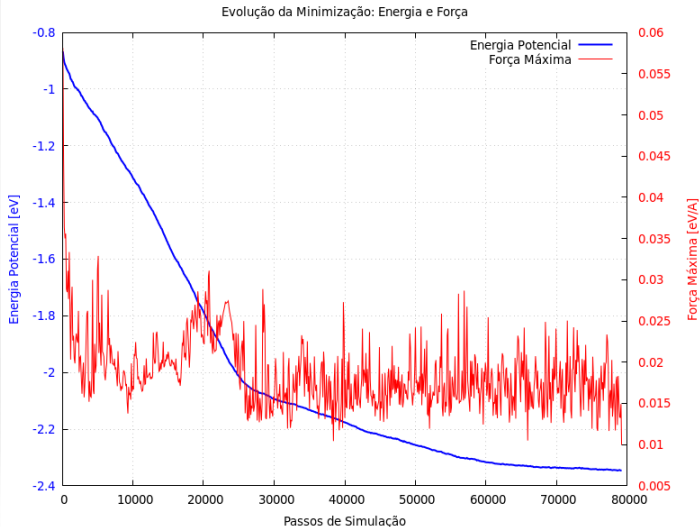


Figure: Convergência: Energia (Azul) e Força (Vermelho).

Detalhe da convergência da força em escala logarítmica:

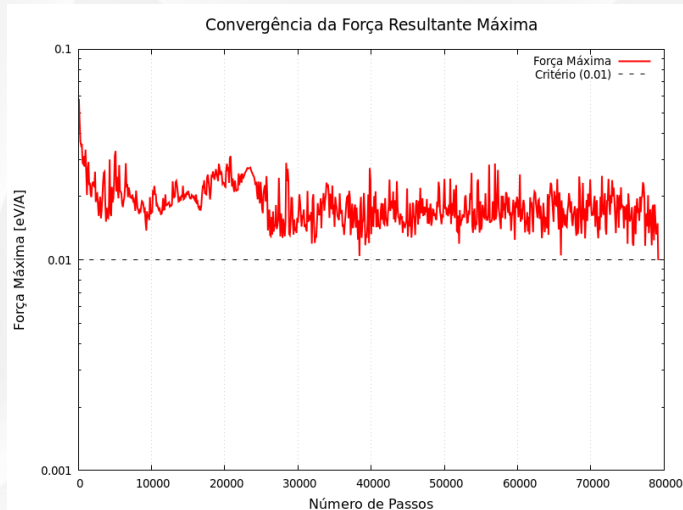


Figure: A força atinge o critério de  $10^{-2}$  eV/Å.

# Impacto do Simulated Annealing (Teste de Controle)

Para validar a abordagem híbrida, comparamos com o **Método do Gradiente** puro (sem o SA).

Table: Comparação de Eficiência: Gradiente vs. Híbrido

Método	Energia (eV)	Passos	Conclusão
Gradiente (Puro)	-1.941	39.123	Mínimo Local
Híbrido (SA + Grad.)	-2.346	79.186	Mínimo Profundo (Estável)

## Análise Crítica:

- Ambos os métodos atingiram o critério de convergência mecânica ( $F < 0.01$ ).
- Porém, o **Gradiente Puro** ficou preso em uma configuração de alta energia.
- O **SA** permitiu escapar dessa "armadilha", melhorando a energia final em  $\approx 21\%$ .

## Análise Final:

- O método híbrido (SA + Gradiente) foi eficaz para minimizar o sistema sem ficar preso nos estados iniciais de alta energia.
- O critério de força  $F < 0.01 \text{ eV/\AA}$  foi rigorosamente satisfeito.

## Comparativo com Teoria

- Valor Teórico ( $N = 50$ ): **-2.543 eV**
- Nosso Resultado: -2.346 eV
- Recuperação da Energia: **92.3%**

A proximidade com o valor teórico valida a implementação do modelo híbrido.

 **Link do repositório**



Obrigado pela atenção!

Utilizamos como benchmark o **Cambridge Cluster Database (CCD)**:

- Banco de dados de mínimos globais para clusters LJ.
- Resultados obtidos por métodos avançados de otimização.
- Permite validar qualitativamente e quantitativamente o código.





# Minimização do Potencial LJ

## Clusters de Partículas

---

Breno Montanha, Lucas, Venâncio

Física Computacional