

Simulación de corriente iónica a través de un nanoporo

Sofía Myskovets Vasylchuk

July 2025

1. Introducción

El objetivo de este proyecto sera el estudio de la corriente iónica a través de un nanoporo, y como este varía al aplicar diferentes voltajes. De esta manera podremos obtener la curva de I-V característica de la estructura y por tanto conocer su comportamiento. Principalmente buscamos confirmar o desmentir que un nanoporo siga la ley de Ohm:

$$I = V/R \tag{1}$$

Este dato representativo es importante ya que estructuras artificiales como los nanoporos tienen un amplio abanico de posibilidades en el día a día. Por ejemplo, como se expone en el tutorial ([http : //www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/#namd](http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/#namd)), conociendo como varía la corriente del nanoporo con ciertos cuerpos, como el caso del ADN, se puede establecer una relación que permita una detección más rápida de las bases nitrogenadas, en este caso.

1.1. Metodología

Las simulaciones se realizaran con la extensión de VMD llamado NAMD. NAMD es un código de dinámica molecular que realiza simulaciones a gran escala de biomoléculas grandes. En varias situaciones utilizaremos archivos .tcl, los cuales son análogos a los scripts de python, con la diferencia que estos archivos VMD los puede leer y por tanto ejecutar desde la consola del propio VMD. Gracias a la consola Tk de VMD podemos crear una conexión más rápida entre NAMD y VMD, lo que permite visualizar el proceso con mayor facilidad.

1.1.1. Preparación del nanoporo

Formamos la membrana a partir de la celda unidad de Si_3N_4 y 'taladramos' el poro por medio de varios scripts. El poro los formamos a partir de la intersección de dos conos por ambos lados de la membrana. Creamos esta forma y no la cilíndrica debido a que la forma anterior es la resultante en los nanoporos contruidos artificialmente con haces de electrones de alta energía.

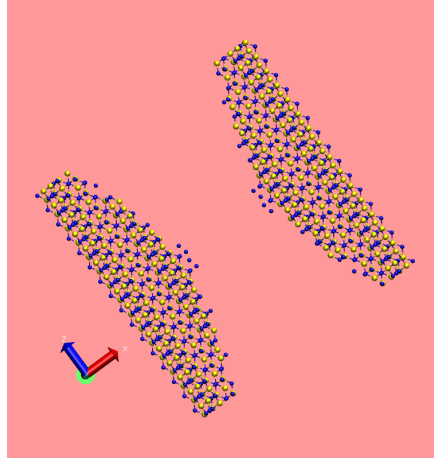


Figura 1: Visualización en el plano xz del nanoporo creado por la intersección de dos conos en un bloque de Si_3N_4

También utilizaremos un script para crear el archivo .psf necesario para los siguientes pasos. Solvataremos y añadiremos los iones a la estructura con la extensión de modelaje de VMD, en el eje y. El solvente será agua donde estableceremos una concentración de KCl de 4 mol/L

Para mayor comodidad, limitaremos tanto la estructura como el solvente en una forma hexagonal (así centramos el poro en la estructura) por medio de archivos .tbc que eliminan los átomos sobrantes (crea archivos .bound) de la estructura.

1.1.2. Preparación de la estructura

Antes de medir la corriente dentro del nanoporo debemos establecer las condiciones en las que realizaremos la simulación. Esta misma preparación la realizaremos en varias etapas por medio de archivos .namd, que son los análogos a los archivos .fdf de SIESTA (establecemos los pasos a seguir por el programa para realizar la simulación)

- ★ Primero, realizamos una minimización de energía de la estructura a 0K, tomando los valores de la celda establecidos en el archivo .bound que creamos anteriormente.
- ★ Segundo, aumentamos la temperatura de manera gradual hasta 295K manteniendo el volumen constante.
- ★ Tercero, equilibramos la estructura a una presión constante con un termostato de Langevin. Aquí establecemos los pasos necesarios para que el volumen deje de fluctuar.
- ★ Cuarto, aplicamos una diferencia de potencial a la estructura a un volumen constante. En el script .namd debemos colocar el valor del campo de fuerza correspondiente al potencial. Este valor los obtenemos por medio de:

$$E_z = U(V/l_z) \quad (2)$$

, donde U es un factor de conversión, l_z es el tamaño del sistema en el eje z y V el voltage aplicado.

- ★ Quinto, por medio de un script .tbc calculamos la corriente iónica correspondiente a la diferencia de potencial que establecimos.

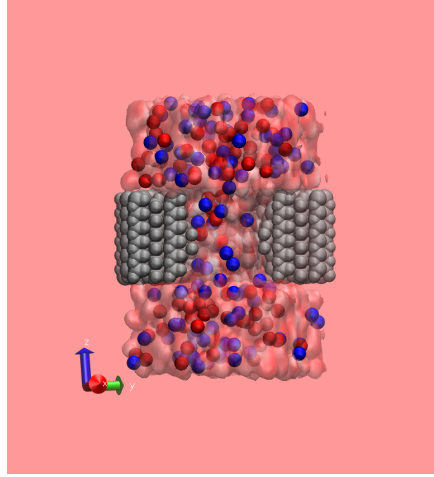


Figura 2: Visualización por VMD de la estructura final del nanoporo con el solvente. Las moléculas rojas son K y las moléculas azules Cl

2. Resultados

Utilizamos una membrana de $n = 6$ con un poro con radio máximo de 15 Å y mínimo de 8 Å para el estudio. También establecemos los siguientes datos en los scripts de NAMD de cada simulación intermedia:

♡ En la minimización establecemos los valores de nuestra celda:

cellBasisVector1 34.1775 19.7323888252 0.0

cellBasisVector2 0.0 39.4647776504 0.0

cellBasisVector3 0.0 0.0 51.0

♡ Para equilibrar la estructura realizamos uns 20000 pasos, lo que da un total de 0,02 ns de simulación. De esta manera el volumen converge en un valor estable para poder proceder a la siguiente simulación.

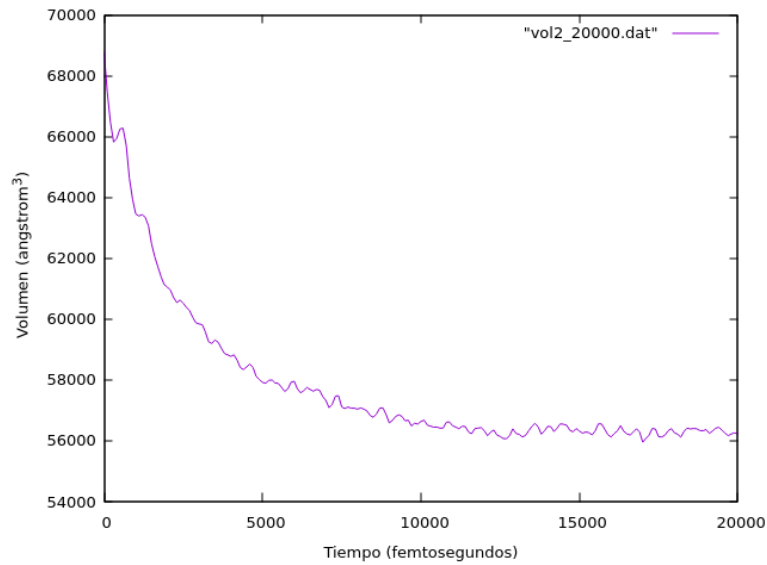


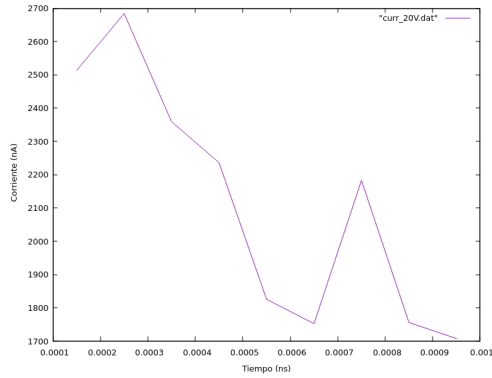
Figura 3: Gráfica de la evolución del volumen durante la simulación donde equilibramos la estructura a una presión constante

♡ Para poder obtener la curva característica I-V establecemos diferentes voltajes (calculamos su correspondiente campo eléctrico con la fórmula (2), donde $-l_z = -44,2066\text{\AA}$ y $U = -23,0605$):

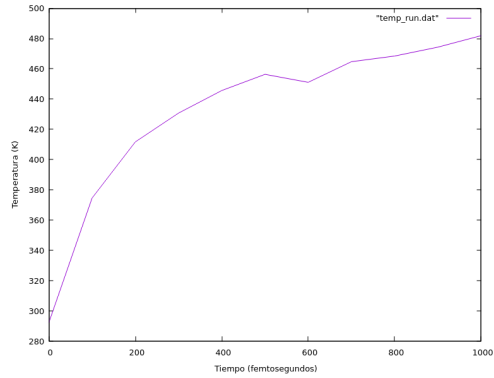
Tabla 1: Valores del campo eléctrico correspondiente a los voltajes aplicados

Voltaje (V)	Campo eléctrico ($kcal/mol\text{\AA}e$)
20	10,433
18	9,389
16	8,346
14	7,303
12	6,259
10	5,216
8	4,173
6	3,129
4	2,086
2	1,043
0	0,00

Primero observamos la corriente que obtenemos al aplicar una diferencia de coltage de 20 V, el cual debemos mencionar es un valor alto.



(a) Corriente creada en el nanoporo



(b) Evolución de la temperatura

Figura 4: Gráficas correspondientes a la simulación donde aplicamos un voltaje de 20 V manteniendo el volumen constante

Primero nos fijamos como la temperatura aumenta hasta los 480K, cuando nosotros lo establecimos a 295K. Esto se debe a que al aplicar un voltaje tan alto creamos una corriente muy grande, lo que provoca que la temperatura suba tanto. Tomaremos en cuenta estos datos, aunque siendo estrictos no deberíamos ya que estas temperaturas invalidarían los resultados para fines biológicos. Por otro lado nos fijamos en la corriente, donde observamos como esta fluctúa bastante, aunque observamos que se podría estabilizar en un valor próximo a 2000 nA. La corriente iónica en el nanoporo se calcula de la siguiente manera:

$$I(t + \Delta t/2) = \frac{1}{\Delta t l_z} \sum_{i=1}^N q_i (z_i(t + \Delta t) - z_i(t)) \quad (3)$$

, donde z_i es la coordenada del ion y q_i se corresponde a la carga del ion, en otras palabras, que la corriente depende del número de iones que cruza el nanoporo. Por tanto si este número fluctúa, también lo hará la corriente. Efectuando mas pasos en la simulación previa podríamos obtener un valor más estable.

Debido a cuestiones de tiempo en la simulación utilizaremos el valor promedio de la corriente que obtengamos con cada voltaje, y así obtener una curva aproximada.

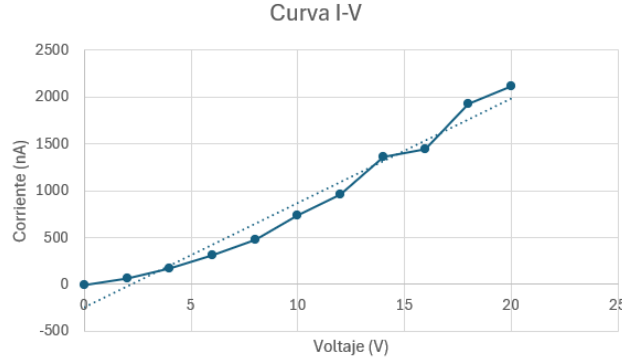


Figura 5: Gráfica que muestra la curva I-V del nanoporo

Observando la gráfica podemos observar cierta tendencia lineal de manera general, con ciertas desviaciones, por lo que podemos suponer que el nanoporo podría cumplir la ley de Ohm. Para verificar esta ley calculamos la resistencia del nanoporo, el cual debe ser constante. Sabemos que la resistencia se calcula como:

$$R = \frac{\rho L}{A} \quad (4)$$

, y la resistividad es $\rho = 1/\sigma$, donde la conductividad de la solución de KCl que utilizamos es $\sigma = 2,08 \cdot 10^{-9} S/\text{\AA}$. Además tomamos como media un radio de $11,5 \text{\AA}$, obteniendo un área de $415,47 \text{\AA}^2$; y una longitud de $44,2066 \text{\AA}$.

Juntando todos estos datos obtenemos que la resistencia del nanoporo es:

$$R = \frac{\frac{1}{2,08 \cdot 10^{-9}} 44,2066}{415,47} = \frac{2,1 \cdot 10^{10}}{415,47} = 5,1 \cdot 10^7 \Omega \quad (5)$$

A continuación calcularemos la corriente que deberíamos obtener por la ley de Ohm al aplicar $20 V$ (voltaje más alto):

$$I = \frac{20}{5,1 \cdot 10^7} = 3,9 \cdot 10^{-7} A \quad (6)$$

, lo que es igual a $390 nA$. Este valor queda muy por debajo del valor obtenido en la simulación ($\approx 2100 nA$), lo que muestra que la corriente no escala de manera lineal con el voltaje.

3. Conclusiones

Con los resultados obtenidos podemos concluir que el nanoporo creado para este proyecto no sigue la ley de Ohm. Hay varias razones por las que se puede dar esta situación, por ejemplo, que en los voltajes altos se produzca una saturación de la corriente debido a la gran velocidad de los portadores. Por otro lado debemos tener en cuenta ciertas interacciones que se dan en los rangos nanoscópicos, como efectos cuánticos o interacciones que cobran mayor importancia en estos rangos como la polarización, que puede provocar un cambio de la resistencia del nanoporo en función del voltaje aplicado, por lo que ya no es constante.

GitHub: <https://github.com/Sofia6978/Simulacion-nanoporos>