

Introducción a la Simulación Computacional

Guía 4: Dinámica Molecular - Potencial y Fuerzas. *Algoritmo de Velocity Verlet*

2^{do} Cuatrimestre de 2025

Docentes: Joaquín Torres y Claudio Pastorino

Se propone realizar distintos programas para implementar progresivamente los algoritmos necesarios para realizar una simulación de Dinámica Molecular para un sistema de partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones.

1. N partículas en una caja

- Realice un programa que defina vectores del tipo $r(3, N)$, $v(3, N)$, $f(3, N)$ para representar posiciones, velocidades y fuerzas de N partículas, que se ubicarán en una caja cúbica de lado L . Como ejemplo, mencionamos que las 3 componentes de la primera dimensión del objeto $r(3, N)$ corresponden a las coordenadas x , y y z de cada partícula.
- Sortee aleatoriamente las coordenadas $r(:, N)$ para definir las posiciones de las N partículas en una configuración inicial.
- Realice una rutina que calcule la energía de interacción de ese sistema de partículas, si el modelo de interacción entre ellas está dado por un potencial de Lennard-Jones de la forma:

$$v(r) = 4\epsilon \left(- \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 + \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right),$$

donde puede tomarse $\sigma = 1$ y $\epsilon = 1$. ϵ es la medida del pozo de potencial, y por lo tanto da cuenta de la intensidad de la interacción (tiene unidades de energía). σ es una medida del diámetro efectivo de las partículas (tiene unidades de longitud). r es la distancia entre un dado par de partículas

La energía potencial del sistema, toma la forma:

$$V = \sum_{i < j} v(r_{ij})$$

- Realice una rutina, que compute la fuerza total sobre cada partícula:

$$f_i = \sum_{j=1, N, j \neq i} -\nabla_{\mathbf{r}_i} v(r)|_{r_{ij}}$$

Cómo requiere un doble *loop* sobre pares de partículas, la rutina que computa la energía potencial total del sistema para ese paso de tiempo, conviene que sea también la que computa la fuerza total sobre cada partículas f_i , debida todas las vecinas.

2. Condiciones periódicas de contorno y radio de corte

- Modifique los algoritmos del problema 1, para que si la partícula está a distancia mayor a $L/2$, se traslade su posición a $r' = r \pm L$, y se utilice esa posición para computar la energía y la fuerza.

- b) Del mismo modo defina un radio de corte $r_c = 2,5\sigma$ a partir del cuál se trunca el potencial y la fuerza. Al hacer eso, es necesario desplazar el potencial (*shifted potential*), para evitar discontinuidades en la energía:

$$v(r) \equiv v_{LJ}(r) - v_{LJ}(r_c)$$

De esta forma, el potencial vale 0 en $v(r_c)$ y, a partir del radio de corte r_c , las partículas no interactúan. Pasamos de pensar en una fuerza muy pequeña a una fuerza estrictamente 0. ¿Por qué esto es importante ?

3. Agregue al programa de dinámica un sencillo método para **minimizar la energía** a partir de la configuración inicial que se genera al azar (y por lo tanto, con altísima probabilidad estará muy lejos de las condiciones de equilibrio del sistema). Esto todavía no es dinámica Newtoniana, sino una minimización de energía. Todavía no hicimos nada con la evolución de las velocidades.

- a) Genere un *loop* de evolución temporal de las coordenadas (trayectoria) que se de la siguiente forma:

$$1) \ r_i(t + dt) = r_i(t) + \frac{1}{2} \frac{f_i}{m_i} dt^2$$

$$2) \ \text{Calcula } f_i \text{ y } E(t + dt)$$

$$3) \ \text{continúa el ciclo en a)}$$

- b) Escriba en un archivo la energía en función del número de paso de tiempo y observe si el programa está minimizando la energía. Notar que hasta aquí, no se definen las velocidades. ¿Se estabiliza en algún valor?

- c) Escriba en un archivo sucesivas configuraciones de las partículas, para poder observarlas como en una “película”, utilizando el programa *vmd*. Los detalles del archivo, del tipo *.vtf* o *.xyz*, se darán en la práctica.

4. **Integrando las ecuaciones de Newton con el algoritmos de *velocity Verlet*.** Modifique el programa para agregar la integración numérica de las ecuaciones de movimiento.

- a) Comience utilizando una densidad número $\rho = N/V = 0,4\sigma^{-3}$.

- b) Utilice como velocidades iniciales una distribución gaussiana con una temperatura dada. Una temperatura posible para un gas de Lennard-Jones, sería $T = 1,5\epsilon/k_B$.

- c) *Realice* un primer *loop* de minimización de energía.

- d) Realice una primera trayectoria de dinámica que será de equilibración o termalización del sistema (del mismo origen y características que las realizadas en MC)

- e) Reduzca progresivamente el paso de tiempo dt , hasta verificar conservación de la energía en un segundo loop de dinámica. Si esto funciona, estan realizando simulaciones en el ensemble microcanónico (*NVE*) !