



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



FCFM

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS**

Simuladores Moleculares

**Termostato de Andersen en un sistema bidimensional
bajo el potencial de Lennard-Jones**

Nombre:
Giovanni Gamaliel López Padilla

Matricula:
1837522

13 de octubre de 2020

Palabras clave: Termostato de Andersen, Lennard-Jones, bidimensional, temperatura, distribución normal

I. INTRODUCCIÓN

La simulación de sistemas moleculares es de gran ayuda para poder analizar estructuras y obtener información como tensiones, fuerzas que resiste el material o que es lo que sucede cuando el sistema esta bajo ciertos efectos o potenciales de interacción. En algunos casos se busca que el sistema se encuentre a una temperatura constante para tener un equilibrio dentro de el o mantener el sistema con esa energía interna, para lograr esto se implementan termostatos en el sistema. La simulación de estos termostatos de manera numérica puede ser implementada de diversas formas, una de ellas es el termostato de Andersen.

II. OBJETIVO GENERAL

Realizar la simulación de un sistema bidimensional de átomos de carbono que estaran bajo la interacción del potencial de Lennard-Jones y el efecto del termostato de Andersen.

III. OBJETIVO ESPECIFICO

- Obtener la distribución radial del sistema para varias densidades dadas.
- Monitorizar la energía total y la temperatura del sistema a lo largo de la simulación.
- Obtener la distribución de velocidades a lo largo de la simulación.

IV. MARCO TEÓRICO

El potencial de Lennard-Jones describe la energía potencial de interacción entre dos átomos o moléculas netros sujetos a dos fuerzas distintas, una fuerza que tiene mayor acción cuando la distancia entre las dos sistemas es grande y la otra fuerza de interacción tiene una mayor acción a corta distancia. Este potencial tiene la siguiente forma:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

donde:

- V es el potencial intermolecular entre dos átomos o partículas.
- ϵ es la profundidad del valle que define que tan fuerte es la atracción entre partículas.
- σ es la distancia a la cual el potencial entre dos partículas es igual a cero.
- r es la distancia de separación entre dos partículas

Los parámetros ϵ y σ son ajustados para reproducir datos experimentales o pueden ser deducidos de resultados a partir de cálculos de química cuántica. La figura 1 es el potencial de Lennard-Jones con $\epsilon = 1$ y $\sigma = 1$.

En donde expone una gráfica de potenciales universales para estructuras de grafito, y la que tenemos se asemeja en comportamiento a pesar de no tener la estructura de un grafito. Teniendo el potencial de la ecuación 1, podemos deducir la fuerza, ya que esta puede ser deducida a partir de aplicar el gradiente a la función $V(r)$, teniendo así la siguiente expresión:

$$\vec{F}(r) = 48\epsilon \left(\frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - \frac{1}{2} \frac{\sigma^6}{r^7} \right) \hat{r} \quad (2)$$

reescribiendo las ecuaciones 1 y 2 para tener la suma de estas en un sistema de n partículas se tiene lo siguiente:

$$U_t = \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j<i}^N V_i, j(|r_j - r_i|) \right\rangle_t \quad (3)$$

$$F_i = \frac{48}{\sigma^2} \sum_{j \neq i} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] (r_j - r_i) \quad (4)$$

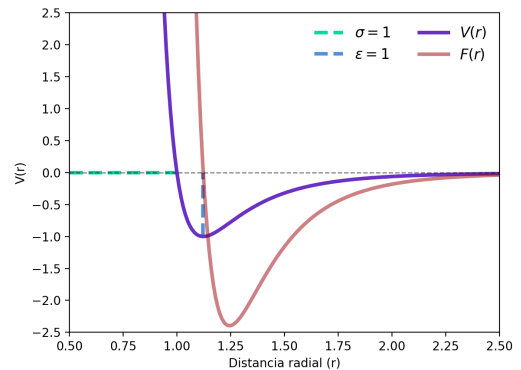


Figura 1: Potencial y fuerza de Lennard-Jones

Dimensión	Número de átomos	ϵ	σ	ρ	Número de pasos	T_0	T_{IT}
2	784	1	1	Variable*	2×10^3	0.6	Variable

Tabla I: Parámetros para las diferentes simulaciones, los valores tomados para las densidades fueron: 0.3, 0.6, 0.8; y para la temperatura del termostato isocinético (T_{IT}) fueron 0.3, 0.5, 0.7, 0.9 y 1.1.

Teniendo ya la dinámica de este sistema podemos ir monitoreando la energía cinética de la siguiente manera:

$$T_t = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m |v_i(t)|^2 \right\rangle \quad (5)$$

por lo tanto, la energía total para un tiempo t será:

$$E_t = T_t + U_t \quad (6)$$

El termostato de Andersen introduce un elemento estocástico a la temperatura teniendo colisiones aleatorias en las moléculas dentro de un entorno imaginario con una temperatura dada. En la aproximación para una partícula, se toma su velocidad y es reasignada por un valor aleatorio de la distribución Maxwell-Boltzmann para una temperatura dada:

$$\phi(v_{qi}) = \left(\frac{m_i}{2\pi k_\beta T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{m_i v_{qi}^2}{2k_\beta T} \right) \quad (7)$$

La cual se asemeja a una distribución normal, la implementación de esta función dentro de la simulación se realizó con la siguiente ecuación:

$$v'_i = \sigma^2 \sqrt{-2 \log(\chi_1)} (\cos(2\pi\chi_2) + \sin(2\pi\chi_2)) + \mu \quad (8)$$

donde la variable χ_i es un número aleatorio de una distribución uniforme. Comprobando que esta función nos regresa una distribución normal se probó con 100,000 valores y se obtuvo el siguiente histograma:

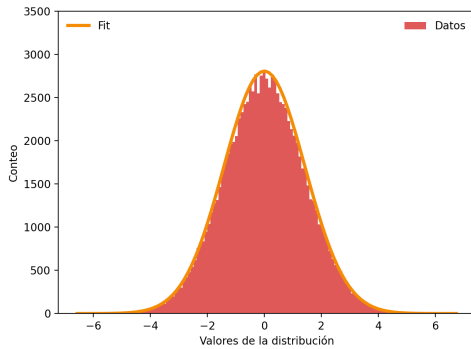


Figura 2: Distribución de valores que arroja la función 8 junto con su fit a una distribución normal.

V. RESULTADOS

VI. CONCLUSIONES

VII. CÓDIGO

■ MD-n2.f

■ Run.py

■ Cor_Graphics.py

■ Energy_Graphics.py

■ Potencial_Graphics.py

■ Temp_Graphics.py

■ vel_Graphics.py

-
- [1] David S. Cerutti, Robert Duke, Peter L. Freddolino, Hao Fan, and Terry P. Lybrand. A vulnerability in popular molecular dynamics packages concerning Langevin and Andersen dynamics. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 4(10):1669–1680, 2008.
- [2] Weinan E and Dong Li. The Andersen thermostat in molecular dynamics. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 61(1):96–136, 2008.
- [3] Philippe H. Hünenberger. Thermostat algorithms for molecular dynamics simulations. *Advances in Polymer Science*, 173:105–147, 2005.
- [4] M.S Shell. Advanced Molecular Dynamics. *Advanced molecular dynamics techniques*, pages 1–11, 2009.
- [5] Simeon D. Stoyanov and Robert D. Groot. From molecular dynamics to hydrodynamics: A novel Galilean invariant thermostat. *Journal of Chemical Physics*, 122(11), 2005.