



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



FCFM

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

Simuladores Moleculares

Dinámica molecular con el potencial
de Lennard-Jones en dos dimensiones
para diferentes densidades usando un termostato isocinético
Omar Gonzalez Amezcua

Nombre:
Giovanni Gamaliel López Padilla

Matricula:
1837522

2 de octubre de 2020

Se propuso un sistema de dos dimensiones conformado por átomos de carbono bajo el potencial de Lennard-Jones donde estuvo en contacto a un termostato isocinético, se realizaron varias simulaciones variando su densidad y la temperatura del termostato, todos bajo la misma temperatura inicial. Se obtuvo que los átomos tienden a estar más agrupados cuando la densidad y la temperatura del termostato están con niveles bajo, en comparación cuando se tiene al sistema con una densidad y temperatura del termostato alta, en donde los átomos tienden a agruparse a diferentes distancias.

Palabras clave: Potencial de Lennard-Jones, distribución radial, dos dimensiones, termostato isocinético.

I. INTRODUCCIÓN

La simulación de estructuras bajo ciertas condiciones es de gran ayuda cuando se necesita conocer que puede llegar a pasar en la experimentación, es por ellos que es necesario la implementación de artefactos físicos para conocer la interacción entre este objeto y el sistema propuesto. El termostato isocinético ayuda al sistema a que encuentre un estado de equilibrio constante, esto variando la temperatura a la cual se encuentra el termostato, la representación física de este objeto puede interpretarse como la temperatura del sistema exterior (ambiente) en el cual se encuentra inmerso nuestro sistema de estudio.

II. OBJETIVO GENERAL

Realizar la implementación del termostato isocinético en la simulación bidimensional de átomos de Carbono afectados por el potencial de Lennard-Jones.

III. OBJETIVO ESPECÍFICO

- Observar el cambio en las distancias radiales variando la densidad y la temperatura del termostato.
- Monitorear la energía total del sistema a lo largo de la simulación.
- Monitorear la temperatura del sistema a lo largo de la simulación para verificar que el termostato se encuentra realizando su acción.

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:

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

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

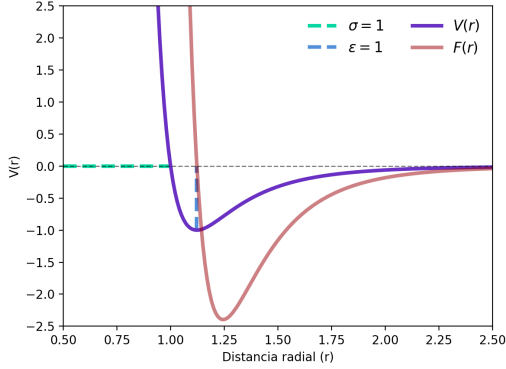


Figura 1: Potencial y fuerza de Lennard-Jones

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 control de temperatura isocinético es un método el cual las velocidades son escalonadas por un parámetro λ a intervalos regulares, el objetivo de esto es obtener una simulación estable con energía cinética media adecuada a la establecida con el termostato.

Este parámetro λ es igual a lo siguiente:

$$\lambda = \sqrt{\frac{T_0}{\tau}} \quad (7)$$

donde τ está definido como:

$$\tau = \langle T \rangle \quad (8)$$

Y la manera que actuará el termostato a lo largo de la simulación es el siguiente:

$$p'_i(t + \Delta t) = \lambda p_i(t + \Delta t) \quad (9)$$

en nuestro caso, como la masa de cada átomo es constante, la ecuación se reescribe como lo siguiente:

$$v'_i(t + \Delta t) = \lambda v_i(t + \Delta t)$$

V. RESULTADOS

Al término de la simulación para diferentes densidades y temperaturas del termostato, este

arroja diferentes resultados contenidos en archivos individuales. La información que se obtiene es la energía cinética, la energía potencial y la temperatura del sistema a lo largo de la simulación y la distribución radial que hay entre cada átomo de carbono.

La simulación de la placa bidimensional fue realizada siguiendo los parámetros mostrados en la tabla I, en la cual la temperatura inicial siempre tuvo el mismo valor, las densidades que se realizaron fueron de 0.3, 0.6 y 0.8, en cambio las temperaturas del termostato isocinético se tomaron los siguientes valores: 0.3, 0.5, 0.7, 0.9 y 1.1.

Observando el comportamiento de la energía total a lo largo de la simulación se puede observar que sigue un comportamiento oscilatorio independientemente de la densidad y la temperatura del termostato isocinético, esto nos da un indicio que el sistema llegó a un punto de equilibrio como se puede mostrar en la figura 2.

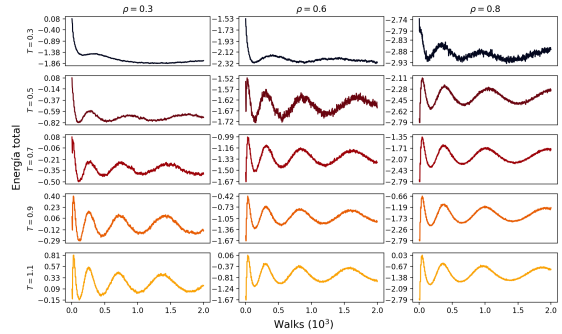


Figura 2: Energía total a lo largo de la simulación de las densidades seleccionadas variando la temperatura del termostato.

Analizando las distancias radiales muestran que a una menor temperatura independientemente de la densidad, los átomos se agrupan más a la distancia de 1, en cambio al aumentar la densidad, los átomos tienden a agruparse en diferentes distancias. Realizando una comparación con la simulación sin el termostato, sucede de igual manera que mientras mayor sea la densidad la concentración de átomos se distribuye en diferentes zonas. Todo lo anterior se puede observar en la figura 3.

Analizando la temperatura de los diferentes sistemas se observa que todos llegan a estar en un equilibrio con el termostato, independientemente de la densidad del sistema, el tiempo que tarda en llegar a este equilibrio depende mayormente de la temperatura del termostato, todo

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.

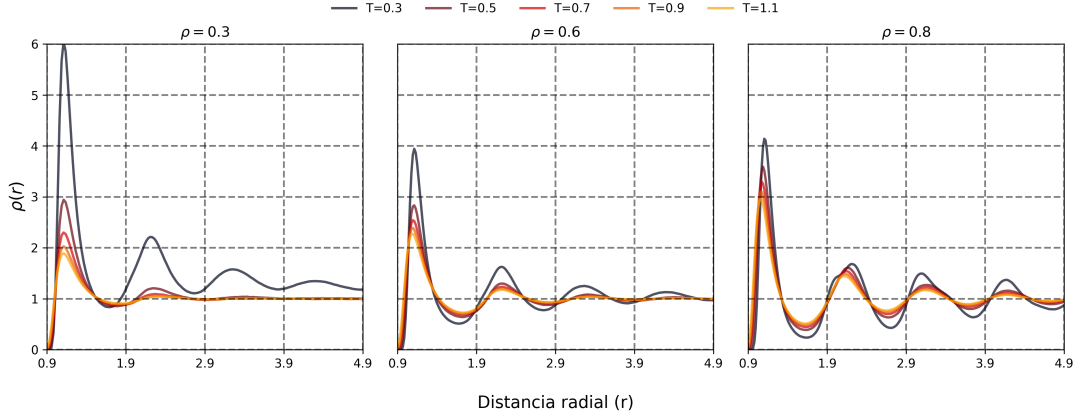


Figura 3: Distribución radial de la estructura

esto se puede observar en la figura 4.

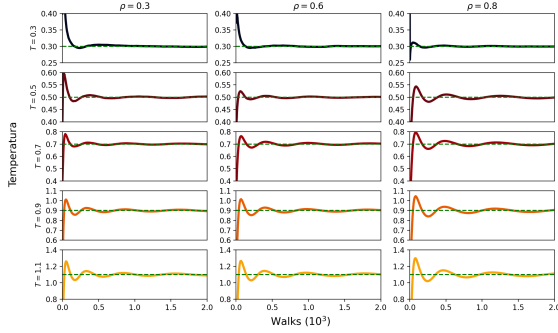


Figura 4: temperatura del sistema para varias densidades y temperaturas del termostato a lo largo de la simulación

VI. CONCLUSIONES

La implementación del termostato isocinético realizó que el sistema estuviera en un estado de equilibrio, ya que, la misma simulación sin esta implementación realizaba mayores variaciones en la energía, esto puede llegar a ser útil para la simulación de un sistema el cual se quiera lle-

var a este estado o aplicarlo experimentalmente para un sistema el cual se necesite estar en equilibrio.

VII. CÓDIGO

- MD-n2.f
Este código contiene la simulación de la placa bidimensional aplicando un potencial de Lennard-Jones y el termostato isocinético.
- Run.py
Este código contiene la automatización de la simulación para las diferentes densidades y temperaturas del termostato.
- Potencial_Graphics.py
Este código realiza la figura 1
- Cor_Graphics.py
Este código realiza la gráfica 3
- Temp_Graphics.py
Este código realiza la figura 4
- Energy_Graphics.py
Este código genera la figura 2

[1] V. V. Begun, M. I. Gorenstein, and O. S. Zozulya. Fluctuations in the canonical ensemble.

- 13, 2005.
- [2] J. M. Borjas-Mayorga, M. E. Grimaldo-Reyna, F. J. Almaguer-Martínez, O. González-Amezcu, and J. R. Cantú-González. Monte Carlo simulation for a gas of hard spheres in d-dimensional space: Equilibrium structure and state equations. *Revista Mexicana de Física E*, 65(2):206–212, 2019.
 - [3] S H Chastain. A simulation experiment with a canonical ensemble. (April 2013):8–11, 2016.
 - [4] Carlos E. Fiore, Vera B. Henriques, and Mario J. De Oliveira. Canonical and microcanonical Monte Carlo simulations of lattice-gas mixtures. *Journal of Chemical Physics*, 125(16):1–9, 2006.
 - [5] Hiqmet Kamberaj. Molecular Dynamics Methods in Simulations of Macromolecules. pages 189–280, 2020.
 - [6] Pascal Viot. Numerical Simulation in Statistical Physics Lecture in Master 2 “ Physics of complex systems ” and “ Modeling , Statistics and Algorithms for out-of-equilibrium systems . 2015.