

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:

I. INTRODUCCIÓN

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

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:

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

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

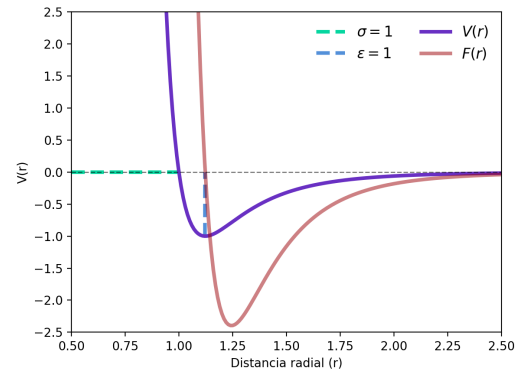


Figura 1: Potencial y fuerza de Lennard-Jones

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 parámetros 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 esta definido como:

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

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

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

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.

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

VI. CONCLUSIONES

VII. CÓDIGO

-
- [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.