



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

14 de octubre de 2020

En este trabajo se presenta la simulación de una red cuadrangular de átomos de carbono para diferentes densidades bajo la interacción del potencial de Lennard-Jones y un termostato de Andersen. Se realizó un monitoreo a la energía cinética, energía potencial, energía total, la temperatura y la velocidad de cada partícula a lo largo del sistema para observar su comportamiento. Esta última se logra apreciar que describe una distribución normal, ya que fue afectada por el termostato de Andersen. Al término de cada simulación se obtuvo la distribución radial observando que los átomos tienden a centrarse a un radio de 1 presentando fluctuaciones en distancias largas.

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 los efectos en el sistema cuando está bajo ciertos ambientes o potenciales de interacción. En algunos casos se busca que el sistema se encuentre a una temperatura constante para tener un equilibrio termodinámico 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 estarán bajo la interacción del potencial de Lennard-Jones y el efecto del termostato de Andersen.

III. OBJETIVO ESPECÍFICO

- 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 netos 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:

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

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

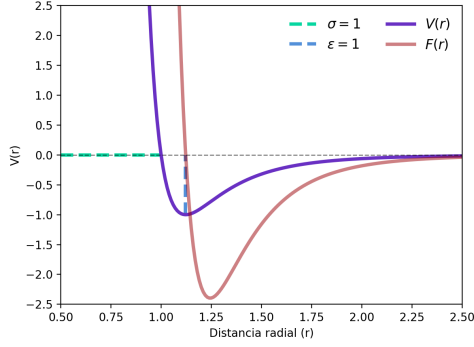


Figura 1: Potencial y fuerza de Lennard-Jones

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 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:

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

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:

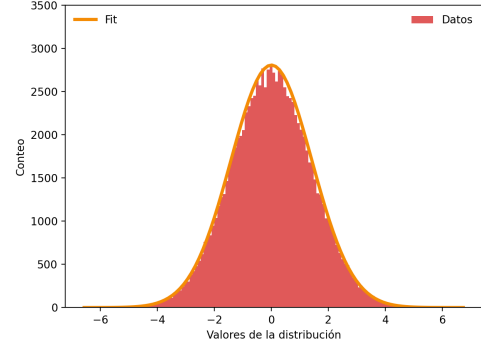


Figura 2: Distribución de valores que arroja la función 8 junto con su fit a una distribución normal.

V. RESULTADOS

Realizando la simulación del sistema bajo los parámetros usados en la tabla I se obtuvo que la energía total de cada sistema se encuentra en un estado oscilatorio, para cada densidad es diferente el valor al cual oscila y en situaciones la energía llega a subir, pero nuevamente decae y vuelve a oscilar. Esto se puede apreciar en la figura 3.

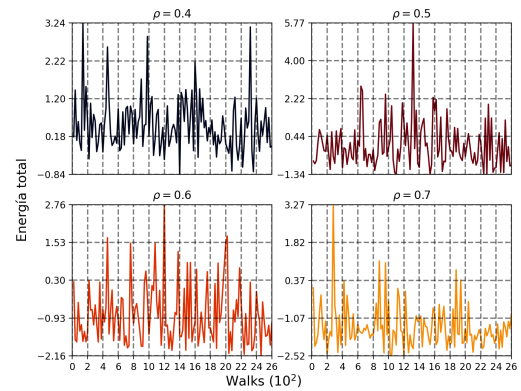


Figura 3: Energía total del sistema a lo largo de la simulación para las densidades utilizadas.

Al estar calculando la energía cinética y potencial del sistema, se pudo obtener la temperatura a cada paso de la simulación. En la figura 4 se aprecia como la temperatura toma un valor constante a lo largo de la simulación realizando pequeñas fluctuaciones alrededor de un valor, en este caso todas alrededor de $T = 2$.

Número de átomos	ϵ_{LJ}	σ_{LJ}	ρ	Número de pasos	T_0	μ	σ^2
784	1	1	Variable*	2×10^3	0.6	0	1

Tabla I: Parámetros para las diferentes simulaciones, los valores tomados para las densidades fueron: 0.4, 0.5, 0.6, 0.7

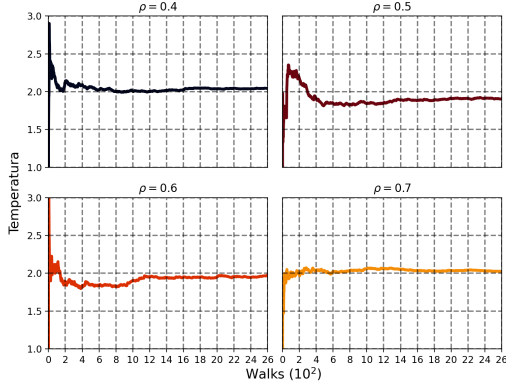


Figura 4: Temperatura del sistema a lo largo de la simulación para las densidades utilizadas.

Del mismo proceso, se obtuvo la figura 4 la cual muestra la distribución radial del sistema para las diferentes densidades usadas para la simulación, en esta se puede observar que los átomos tienden a estar a una distancia cercana entre todos, en las mismas distribuciones se aprecia que presenta fluctuaciones a diferentes distancias.

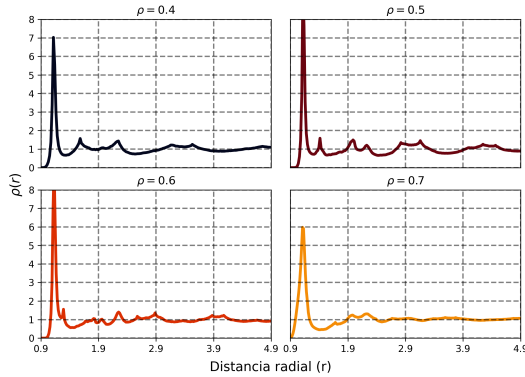


Figura 5: Distribución radial del sistema obtenida para las densidades utilizadas.

Durante la simulación se grabaron las velocidades en x y y de todas las partículas, por lo que al agruparlas en un arreglo, uno para cada densidad, se obtuvo la figura 6. A cada conjunto de velocidades se le realizó un fit con la distribución normal, mostrando así que estas velocidades se encuentran dentro de una distribución

normal.

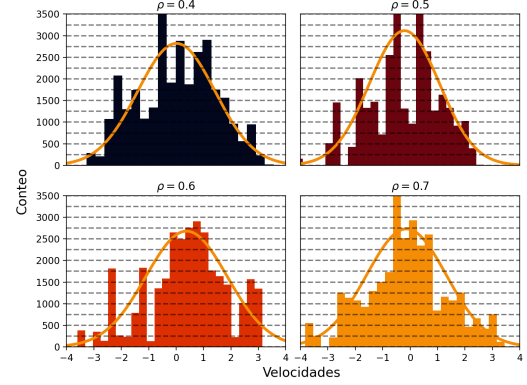


Figura 6: Distribución de las velocidades de los diferentes sistemas junto con un fit de una distribución normal.

VI. CONCLUSIONES

La implementación del termostato de Andersen es eficiente para obtener un sistema en equilibrio termodinámico, pero la distribución radial se ve afectada, ya que no presenta valores definidos en los cuales tenga curvas suaves. En cambio, si lo que se prefiere es que las velocidades de las partículas formen una distribución uniforme el termostato de Andersen podrá realizarlo.

La estabilidad en las energías no es algo de esperarse de este contexto, ya que el cambio en las velocidades puede ser drástico y con ello formar pendientes altas en esta función.

VII. CÓDIGO

■ MD-n2.f

Programa que lleva la simulación del sistema bidimensional con el potencial de Lennard-Jones y el termostato de Andersen.

■ Run.py

Programa lleva la automatización de la simulación para las diferentes densidades.

- `Potencial_Graphics.py`
Programa que realiza la figura 1.
- `Normal_dis.f`
Programa que da 100,000 valores usando la distribución de la ecuación 8.
- `normal_Graphics.py`
Programa que genera la figura 2 usando los datos generados por `Normal_dis.f`.
- `Energy_Graphics.py`
Programa que realiza la figura 3.
- `Temp_Graphics.py`
Programa que realiza la figura 4.
- `Cor_Graphics.py`
Programa que realiza la figura 5.
- `vel_Graphics.py`
Programa que realiza la figura 6.

-
- [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.