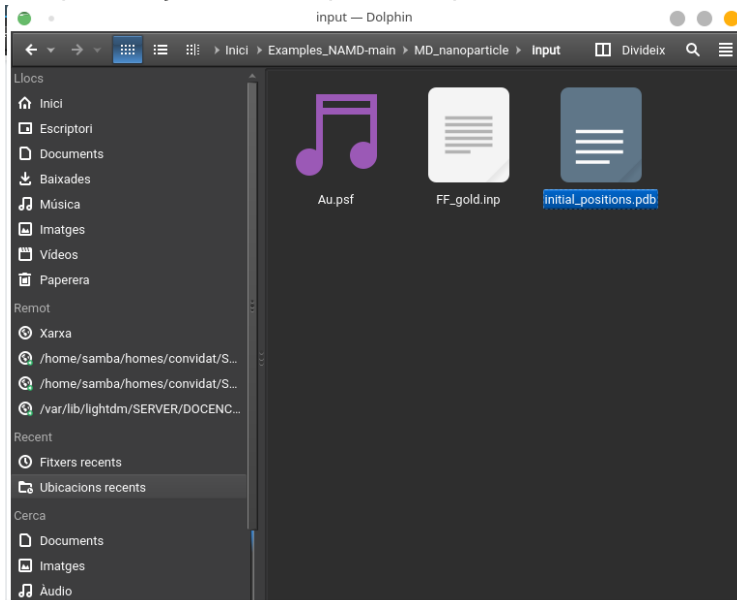


PRACTICA NAMD

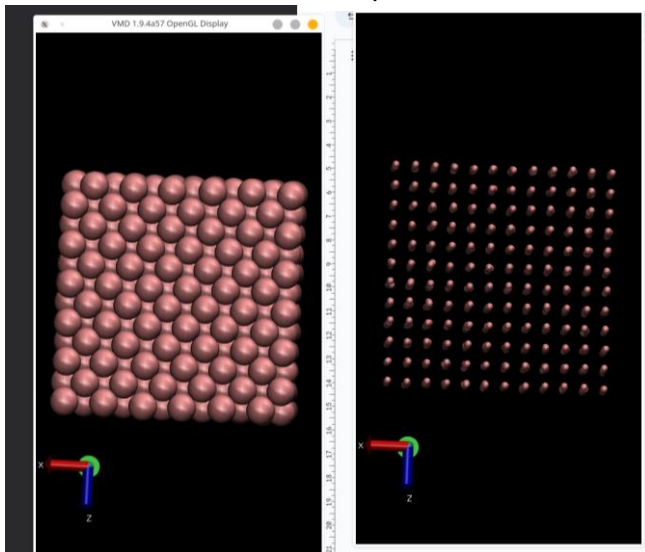
Els arxius que se'ns demanen estan a MD_Nanoparticle->Input i son el FF_gold per el camp de força i el initial_positions per la situació inicial



Il·lustració 1: Arxius que se'ns demana al apartat 1

Observant el arxiu del camp de força podem veure que la interacció que considera aquesta simulació es la de **Lennard-Jones**, que es un model senzill que considera una força atractiva a grans distancies i una repulsiva a distancies curtes.

Al obrir VMD i carregar els arxius que se'ns indica podem observar el següent resultat per visualització VDW i CPK respectivament:

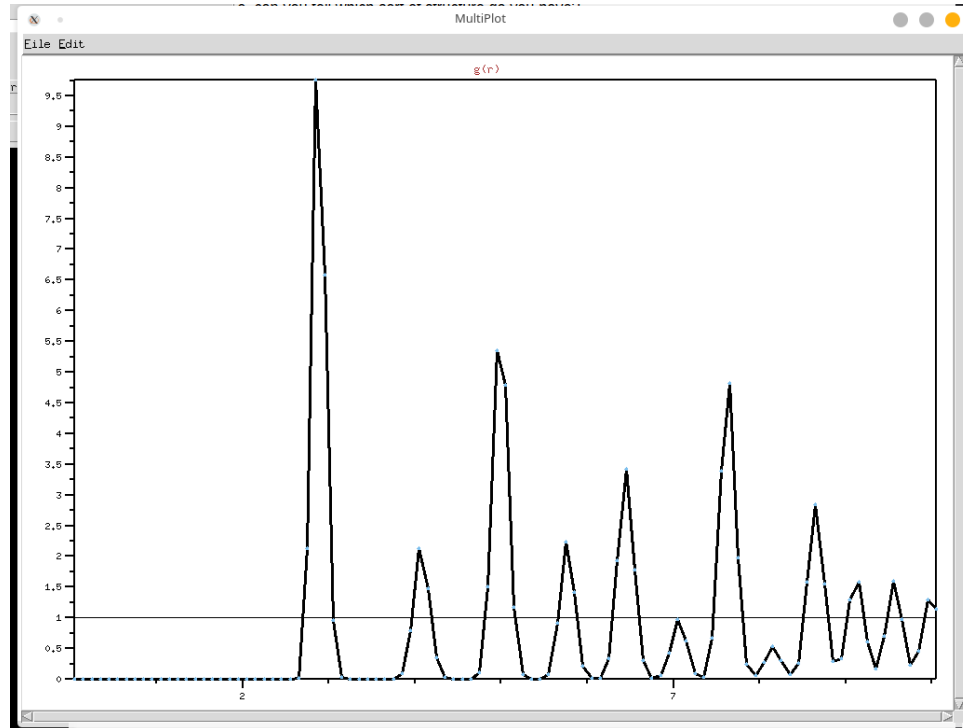


Il·lustració 2: Visualització amb VDW (dreta) i CPK (esquerra) de la simulació

Com podem veure es tracta de una xarxa formada per cel·les cubiques centrada a les cares, tot i això observant la imatge CPK i intentant alinearla sembla que no sigui perfecte i presenti defectes que fan que no tots els àtoms es trobin perfectament alineats com haurien de estar.

Al fer servir label per a mirar la distància d'enllaç veiem que la distància entre dos primers veïns es de 2,7 Å aproximadament, intentant-ho a altres cel·les unitat em donava valors de 2,8 o 2,88

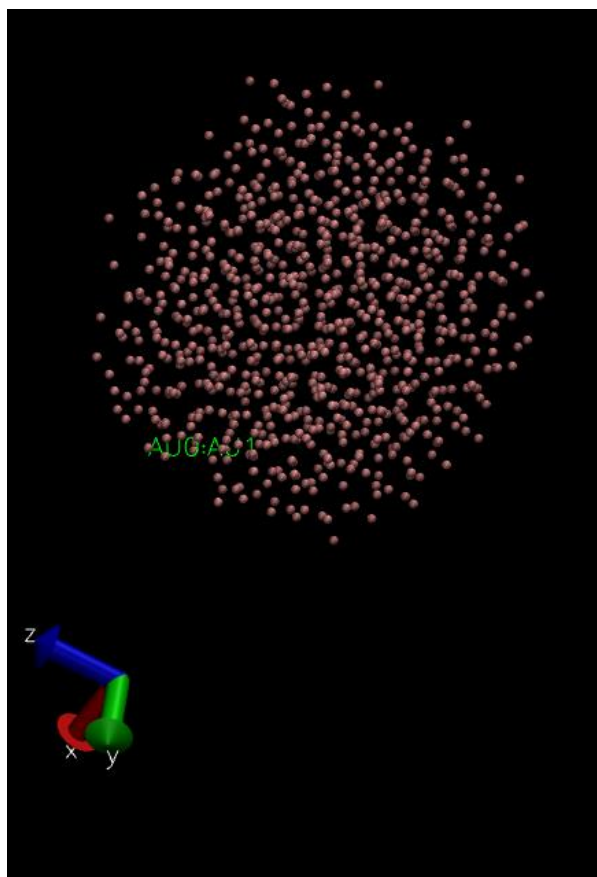
Després es fa la simulació de $g(r)$ obtenint el següent resultat



Gràfic 1 $G(r)$ de la situació inicial:

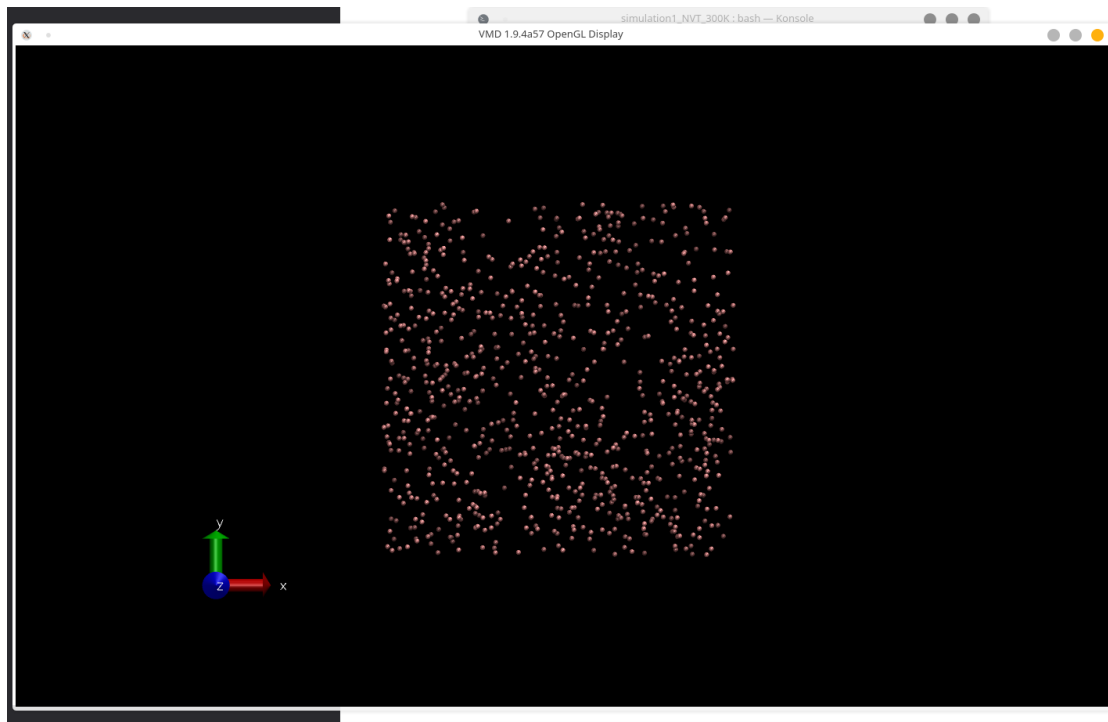
Aquests pics representaran la densitat dels enllaços (el numero d'enllaços que trobem a una distància d'enllaç x), com podem veure el primer es el dels primers veïns i per tant serà el més freqüent, i es troba a aproximadament 2,8 Å, validant el resultat obtingut anteriorment. A més trobem altres pics a distàncies de segons i tercers veïns, per exemple el segon pic, a 4,23 Å aproximadament, es el de interacció d'àtoms a cantonades de la cel·la que es troben a aquesta distància.

Al carregar i observar les simulacions que se'ns donen observem els següents resultats: Vibració de les molècules, veient-se més clarament en les que es troben al extrem de la simulació ja que no tenen altres molècules que les continguin per repulsió. Al canviar a la simulació de 1500K es perd completament la estructura, estem aportant tanta energia que la vibració es tant violenta que deixa de formar cel·les, de fet molt probablement a nivell macroscòpic s'hauria apreciat un canvi de fase, passant a líquid i fins i tot a gas.



Il·lustració 3: Imatge congelada de la simulació a 1500K (no afegeixo la de 300 ja que al congelar frame es veuen semblants)

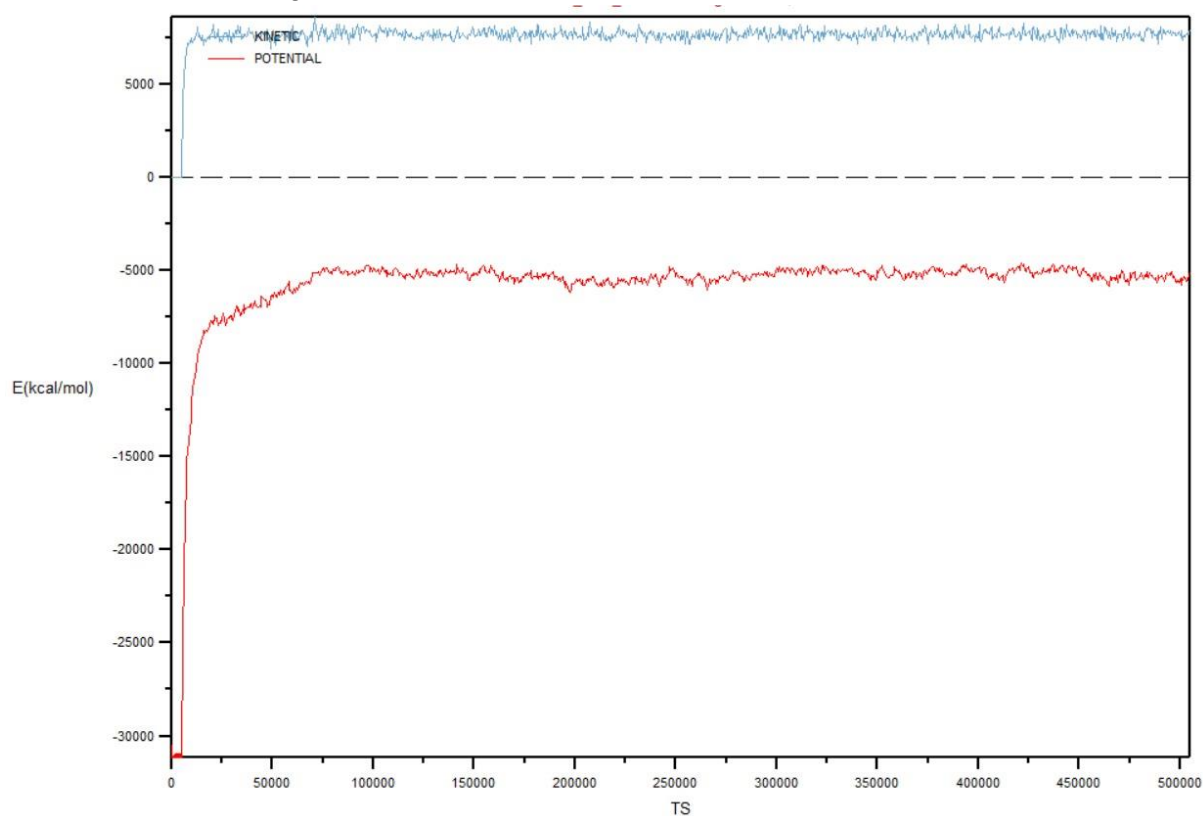
MODIFICACIÓ PROPIA



Il·lustració 4: Visualització d'un frame congelat de la simulació amb la modificació pròpia

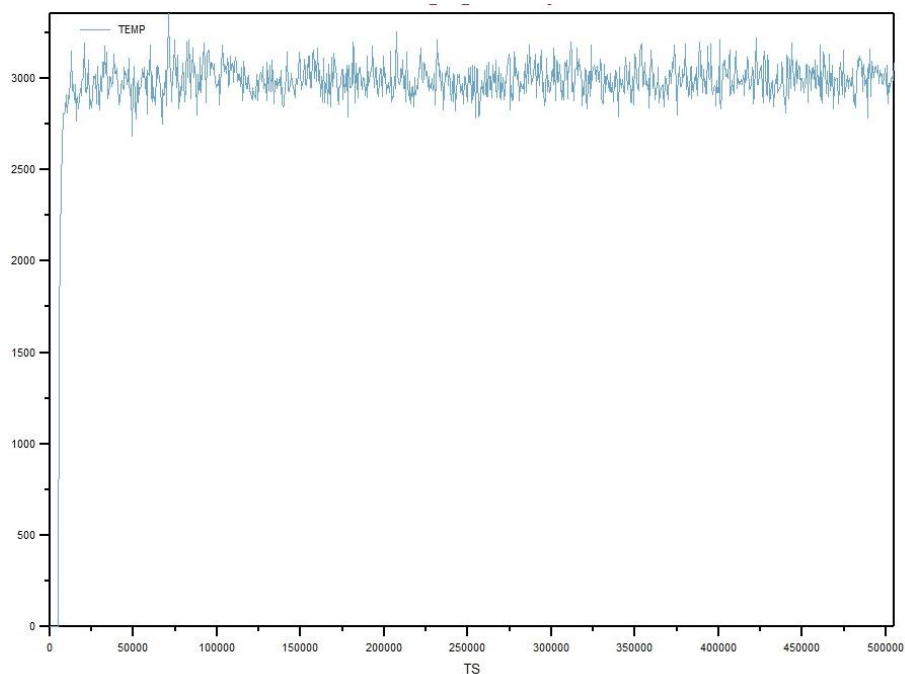
Per comprovar si estàvem en estat líquid o gas la modificació que he implementat al arxiu .namd es augmentar la temperatura fins a 3000K, un cop correguda la simulació i obtinguts els nous arxius .dcd podem visualitzar-la a VMD, aquestes es mouen a un ritme molt mes gran i caòtic que les anteriors, i arriben a ocupar tot l'espai que delimita la simulació, d'aquesta forma puc afirmar amb bastanta seguretat que abans teníem líquid (a 1500K) i que ara hem arribat a la fase gasosa

Al mirar el gràfic de energia cinètica i potencial en funció del temps en aquesta simulació ens trobem amb el següent resultat:



Gràfic 2: Plot combinat d'EC i EP d'aquesta simulació

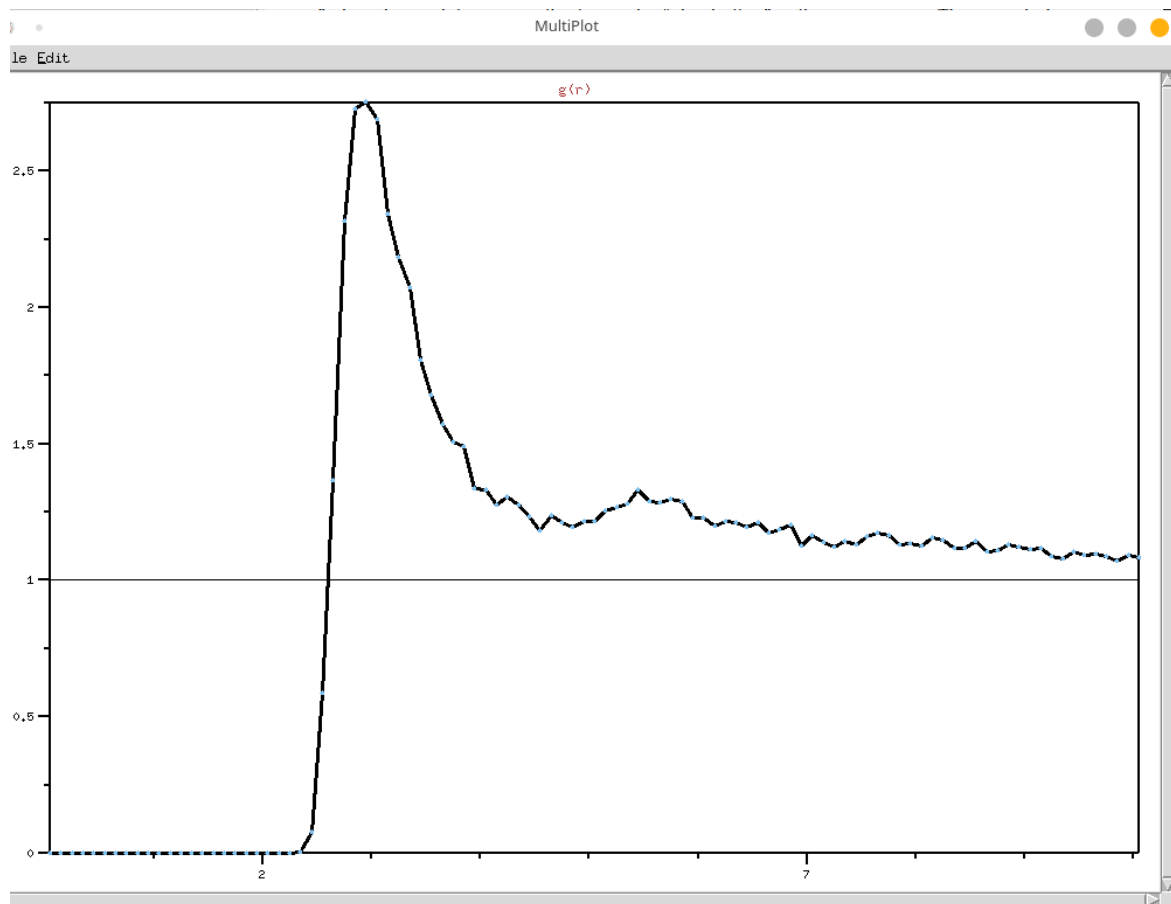
Veiem que ambdues energies tenen un augment ràpid en els primers femtosegons (la potencial més brusc que la cinètica), aquestes partien de 0 (la cinètica) i el mínim energètic (la potencial) ja que ens trobàvem en la situació d'equilibri, que he alterat, i podem veure que ambdues acaben a 5000 kcal/mol (positius la cinètica i negatius la potencial)
A més a més veiem la següent evolució en la temperatura:



Gràfic 3: Plot de T vs t

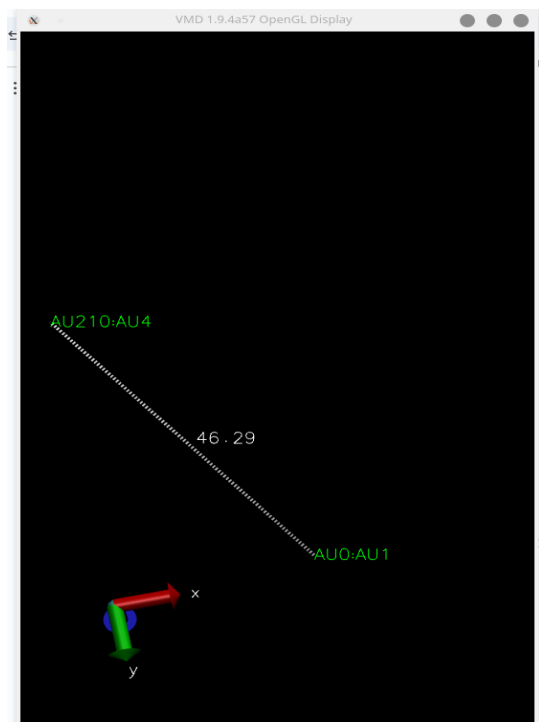
En aquest veiem com el període de augment del anterior gràfic es deu a la evolució de la temperatura, ja que aquesta comença en el 0 absolut i puja fins a la T indicada (3000K) fent que la energia augmenti, una cosa curiosa és que aquesta no es manté perfectament estable sinó que fluctua tenint com a mitjana 3000, per això les energies tampoc s'estabilitzen del tot.

Agafant els últims 15 frames de la simulació obtenim la següent distribució de distàncies, podem veure que cap parell està més pròxim que el mínim que havíem trobat entre primers veïns, de uns 2,8Å, però a partir d'allà deixa de seguir cap relació lògica donant "pics" per pràcticament tots els valors ja que els àtoms estan tant dispersos que per probabilitat trobem parells d'àtoms a totes les distàncies possibles, perdent completament la estructura periòdica que teníem a la situació inicial, a més a més tots aquests tenen una densitat de aproximadament 1, veient que tenim una distribució molt gran entre ells demostrant que la seva distribució és completament aleatòria (igual que si féssim la densitat de resultats de llençar un dau en principi tots els valors haurien de donar el mateix)



Gràfic 4: $G(r)$ dels últims 15 frames de la simulació modificada

Al tenir tanta velocitat el intentar observar dos àtoms en concret es molt caòtic, la seva distancia per exemple passa de un frame al següent de 20 a 58, el que es mes aquest vector desplaçament va en sentit contrari entre aquests dos frames, quedant-se un àtom quasi quiet (potser per acabar de xocar amb un altre) i l'altre desplaçant-se casi 80 Armstrongs en 2 femtosegons. A l'hora de representar-ho no he aconseguit trobar la opció per mostrar dos àtoms en concrets així que a la imatge representativa es veuran els seus noms a la posició on es troben.



Il·lustració 5: Enllaç entre dos primers veïns en un dels últims frames de la simulació modificada