

Introducción a la Simulación Computacional

Guía 5: Dinámica Molecular de un fluido de Lennard-Jones

Docentes: Joaquín Torres y Claudio Pastorino

Se propone simular por Dinámica Molecular un sistema de N partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones en el ensemble canónico (NVT). La temperatura se mantendrá constante con el termostato de *Langevin*, explicado en las clases teóricas. Se entregará un Informe exponiendo los resultados de las simulaciones y un archivo con todos los archivos fuente y de input del programa.

Se espera que el programa producido para comenzar el proyecto, tenga implementado correctamente los siguientes algoritmos. Para detalles de los distintos bloques referirse a la teórica o consultar.

- Cálculo de energía y fuerza.
- Condiciones periódicas de contorno en el cálculo de la fuerza y la evolución de las partículas.
- Algoritmo de *velocity verlet*, para integración de las ecuaciones de movimiento.

En el loop de dinámica molecular el esquema de integración debería tener sucesivamente las siguientes rutinas:

- $r(t + dt)$; $v(t + \frac{1}{2}dt)$. **Rutina:** *verlet_positions()*
- $force(t + dt)$. Cálculo de la fuerza, la energía potencial (V) y la parte del Virial de la presión. **Rutina:** *force()*
- Fuerzas del termostato de *Langevin*. Se suman a la fuerza sobre cada partícula calculada en la rutina anterior. Rutina: *lgv_force()*
- $v(r + dt)$. **Rutina:** *verlet_velocities()*
- Cálculo de cantidades físicas: K , $E = K + V$ y otras cantidades que se irán agregando. **Rutina:** *measurements()*

Nota: Los nombres de las rutinas son sólo pautas para organizar el programa.

En el proyecto deberán estudiarse los siguientes puntos:

1. **Estudio a Temperatura constante, variando densidad.** Realizar un conjunto de simulaciones sistemáticas a temperatura $T = 1,1\epsilon/k_B$ en función de la densidad. Tomar densidades en los puntos $\rho = \frac{N}{V} = [10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 0,8, 0,9, 1,0]\sigma^{-3}$ y 10 puntos adicionales en el intervalo $[10^{-1}, 0,8]\sigma^{-3}$.
 - a) Obtener en los distintos casos la presión media p para armar una curva presión vs. densidad. Cotejar resultados con los de la referencia [1].
 - b) Obtener las fluctuaciones de la presión ($\sigma(p) = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$) y analizarlas cualitativamente, en base al diagrama de fases del fluido de Lennard-Jones (Fig. 6 en ref. [1]).
 - c) Obtener datos cualitativos de lo que se observa en distintas regiones del espacio de fases de las trayectorias de dinámica molecular, visualizadas con *vmd* y *ovito*. Ilustrar lo observado con configuraciones características a diferentes densidades y temperaturas.

2. **Estudio a densidad constante, variando temperatura.** Realizar una simulación sistemática a densidad $\rho = 0,4\sigma^{-3}$ en función de la temperatura. Tomar 10 temperaturas en el intervalo $[0,7, 1,4]$

- a) Obtener la curva de presión media vs. T . La presión puede computarse como el promedio sobre la trayectoria de la presión instantánea, proveniente del desarrollo del virial:

$$P_{\text{inst}}(t) = \frac{Nk_B T_{\text{inst}}(t)}{V} + \frac{1}{3V} \sum_{i < j} \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} \quad (1)$$

La parte de $r_{ij} \cdot F_{ij}$ conviene calcularla en la rutina de fuerzas cuando se hace el loop de pares de partícula i y j .

- b) Obtener las fluctuaciones de la presión ($\sigma(p) = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$) y analizarlas cualitativamente, en base al diagrama de fases del fluido de Lennard-Jones (Fig. 6 en ref. [1]).
- c) Obtener datos cualitativos de lo que se observa en distintas regiones del espacio de fases de las trayectorias de dinámica molecular, visualizadas con *vmd*. Ilustrar lo observado con configuraciones características.
3. Para los puntos del diagrama de fase que se indican a continuación, obtener la **función de distribución radial** (función de correlación de pares) $g(r)$. Analizar las diferencias cualitativas en los diferentes puntos del espacio de fases termodinámicos.

- a) $T = 1,1\varepsilon/k_B$; $\rho = 10^{-3}\sigma^{-3}$.
- b) $T = 1,1\varepsilon/k_B$; $\rho = 0,3\sigma^{-3}$.
- c) $T = 1,4\varepsilon/k_B$; $\rho = 0,3\sigma^{-3}$.
- d) $T = 1,1\varepsilon/k_B$; $\rho = 0,8\sigma^{-3}$.

Sugerencias

- Antes de empezar el estudio (corridas de producción), es importante verificar que el algoritmo de MD básico funciona correctamente. Pueden tomar por ejemplo una densidad de $\rho = 0,4\sigma^{-3}$ y con un paso de tiempo de $dt = 0,0001\tau$, verificar que se conserva la energía total $E = T + V$.
- Realizar entre 10^6 y 5×10^6 pasos de tiempo de dinámica.
- Puede tomarse siempre $N = 200$ partículas y modificar el lado de la caja L , para obtener la densidad requerida.
- Tomar un coeficiente de fricción $\gamma = 0,5$ o menor, en el termostato de Langevin.
- Un paso de tiempo razonable cuando se usa el termostato de Langevin en el ensemble canónico, es $dt = 0,002\tau$. Verificar de todas formas conservación de temperatura. Para ello escribir cada 500 pasos la temperatura instantánea.

Referencias

- [1] Johnson et al. *Mol. Phys.* **78**, p. 591 (1993)