

Mediciones en dinámica molecular



24 de Junio de 2021

Pseudo-código

```
main()
{
  condiciones_iniciales();
  tablas();

  fuerzas_iniciales();

  for (nt = 0; nt < nt_maximo; nt++)
  {
    termalizacion();
    T_actual = calculo_temperatura();

    //mediciones();

    T_deseada = T_actual - T_max/(double)nt_maximo;

    reescaleo_velocidades();
  }
}
```


Loop de
temperaturas

Más data acá: Understanding molecular simulations, Frenkel-Smit, capítulo 4.

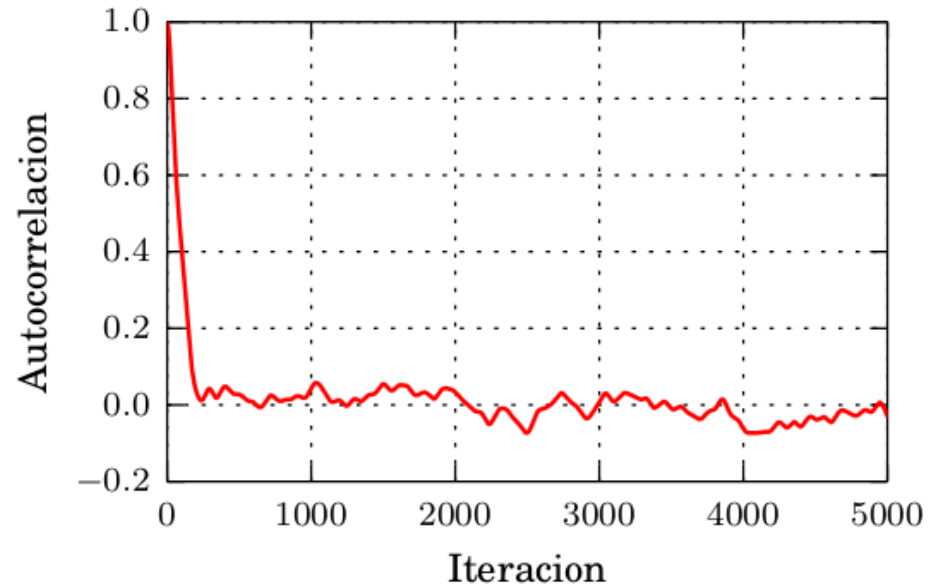
Descorrelacionando nuestras mediciones

Al igual que en Ising, debemos calcular la mínima cantidad de pasos necesarios para descorrelacionar las mediciones.

- Podemos usar como observables la energía cinética o la energía potencial.

Potencial 
($T = 0.728$ y
 $\rho=0.8442$, $N=512$)

$$r_k = \frac{\sum_{i=1}^{N-k} (Y_i - \bar{Y})(Y_{i+k} - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2}$$



Física Estadística Computacional

Dinámica molecular - 1° cuatrimestre 2021

Problema 1: gas de Lennard-Jones

Considere un sistema de 512 partículas que interactúan a través de un potencial del tipo Lennard-Jones, ubicadas inicialmente en una red cúbica simple. Confiera al sistema inicialmente una “temperatura” $T = 0.728$ y una densidad $\rho = 0.8442$. Deje evolucionar al sistema utilizando un algoritmo de dinámica molecular que genere estados en el ensamble microcanónico.

- Grafique la evolución de la energía total, la energía cinética y la potencial del sistema ¿En cuánto estima el tiempo de termalización?
- Estime las fluctuaciones, en el equilibrio, que presentan las cantidades estudiadas en el punto anterior. Tenga en cuenta que configuraciones sucesivas pueden presentar cierto grado de correlación.
- Repita los puntos anteriores para diferentes “temperaturas” iniciales de manera de obtener diferentes temperaturas de equilibrio. Estudie el comportamiento de la energía total en función de la temperatura de equilibrio $E(T)$. Estime C_V a partir de esta curva y compárelo con el valor de C_V calculado a partir de fluctuaciones de las cantidades apropiadas en un ensamble microcanónico.

Problema 2: transiciones de fase

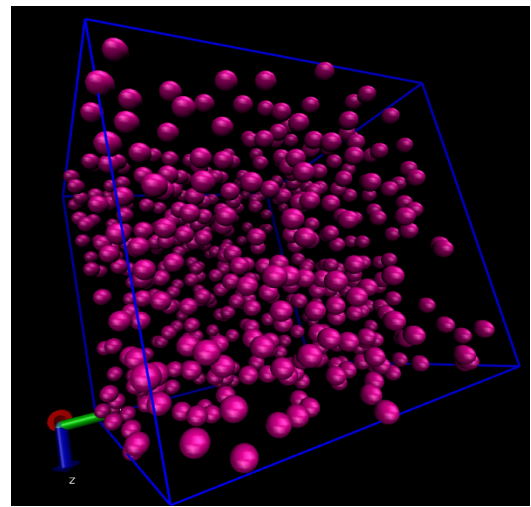
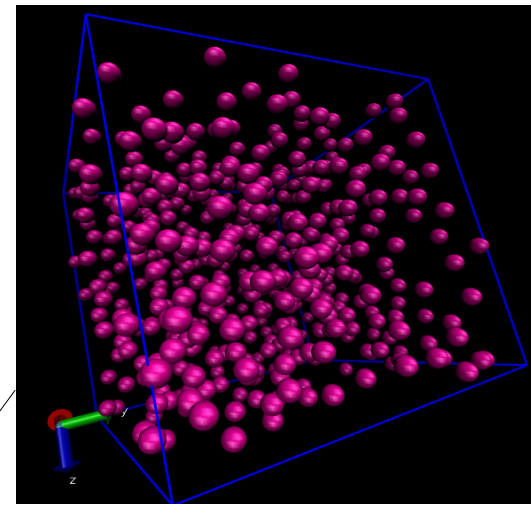
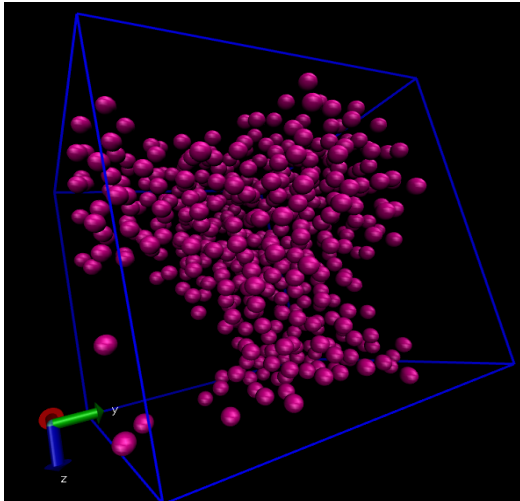
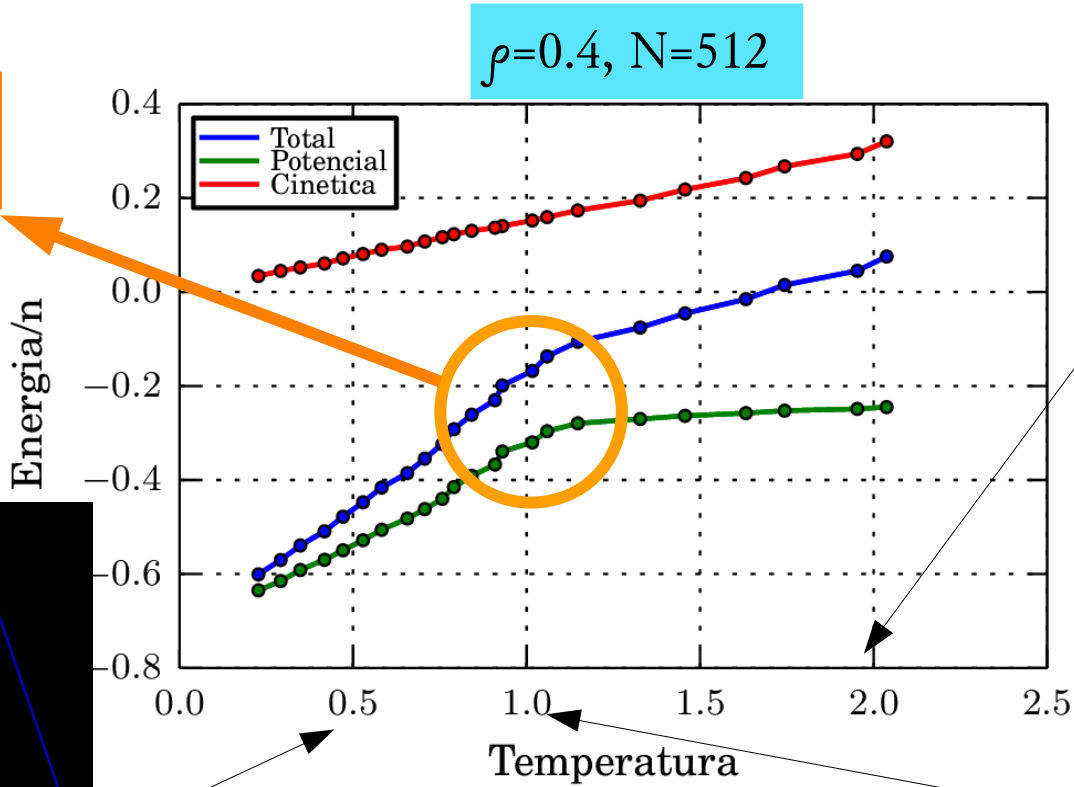
Encuentre la dependencia de la energía total E y la presión P con la temperatura T para un sistema de 125 partículas Lennard-Jones, para el rango de temperaturas $T \in [0.4, 2.0]$ y para un rango de densidades $\rho \in [0.4, 0.8]$. Utilice para ello el método de *rescaling* de velocidades. Asegúrese de tomar las mediciones una vez que la muestra haya termalizado en cada caso. ¿Cómo cambian los resultados si se utilizan 512 partículas?

Problema 3: función de distribución radial

Calcule la función de distribución radial $g(r)$ para el sistema del punto anterior, a temperatura $T = 1.5$ y $\rho = 0.6, 0.8$ y 1.0. Explique el comportamiento cualitativo observado.

Energías vs. Temperatura

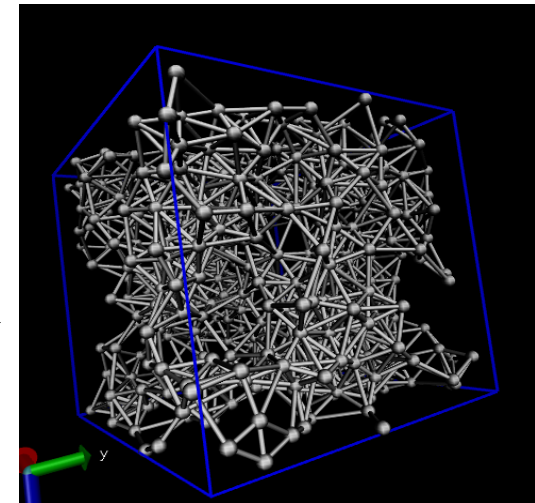
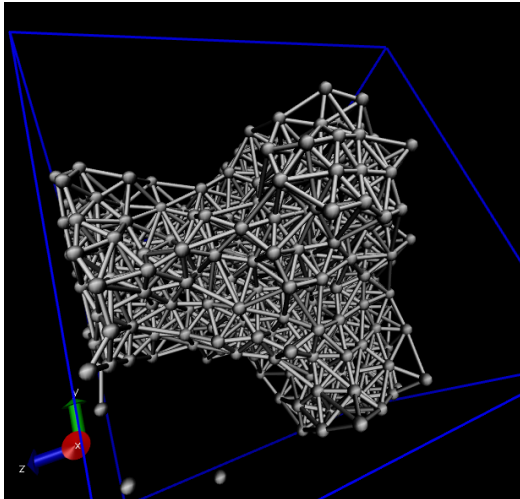
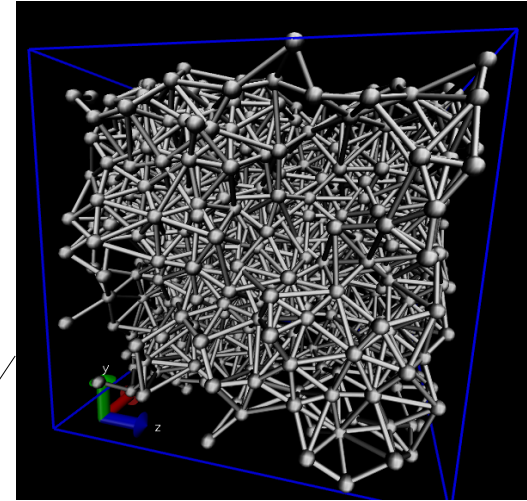
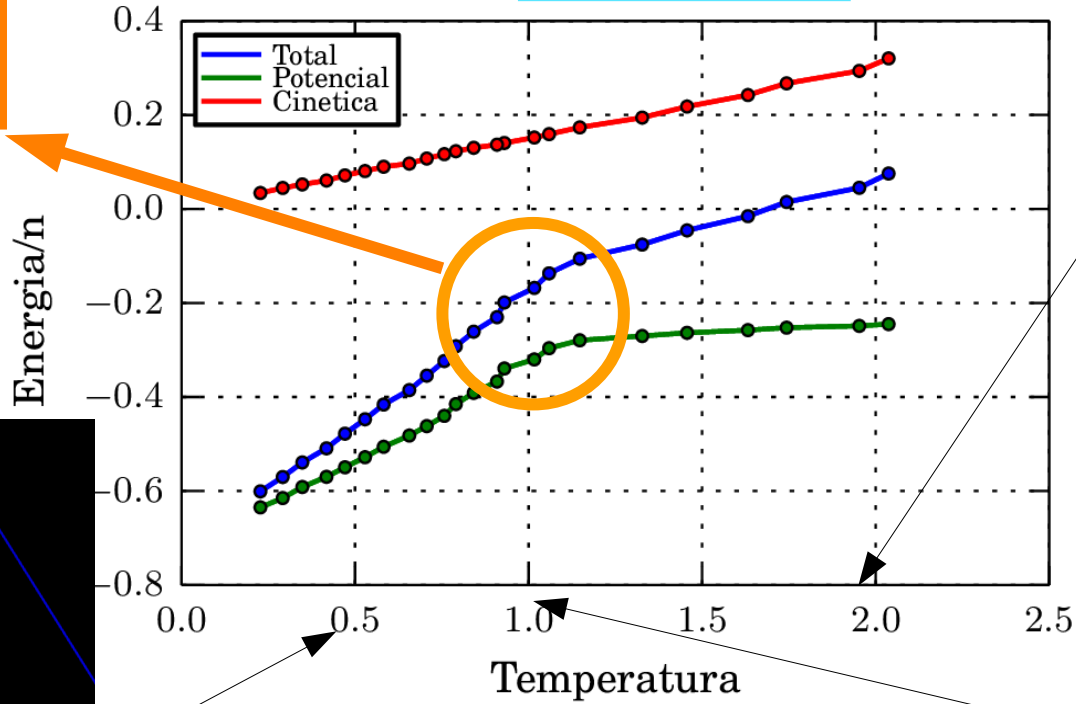
¿Cambio de fase?



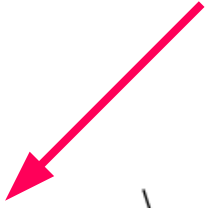
Energías vs. Temperatura

¿Cambio de fase?

$\rho=0.4, N=512$



Presión de exceso

$$P = \rho k_B T + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i,j} \frac{1}{2} \bar{F}(\bar{r}_{ij}) \cdot \bar{r}_{ij} \right\rangle$$


Ya lo tenemos “casi” calculado

```
int a = (int) (distancia*nf/d_corte) - 1;
actualizacion = fuerzas[a]*dx/distancia;
p += actualizacion * dx;
f_x_t_h[i] += actualizacion;
f_x_t_h[j] -= actualizacion;

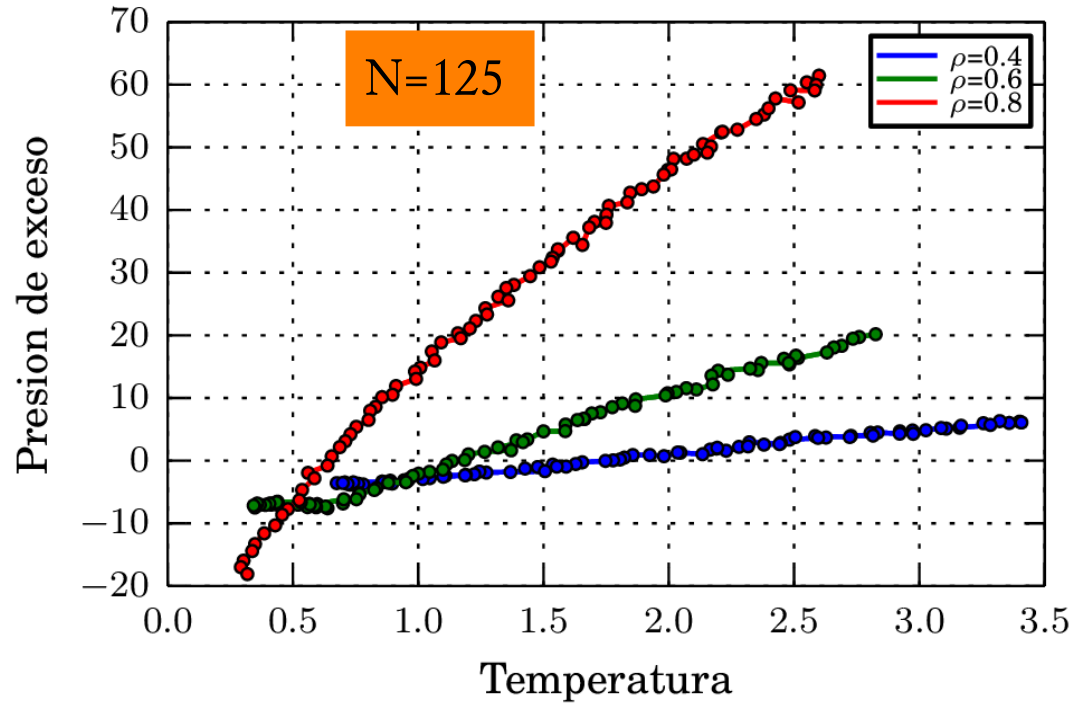
actualizacion = fuerzas[a]*dy/distancia;
p += actualizacion * dy;
f_y_t_h[i] += actualizacion;
f_y_t_h[j] -= actualizacion;

actualizacion = fuerzas[a]*dz/distancia;
p += actualizacion * dz;
f_z_t_h[i] += actualizacion;
f_z_t_h[j] -= actualizacion;
```

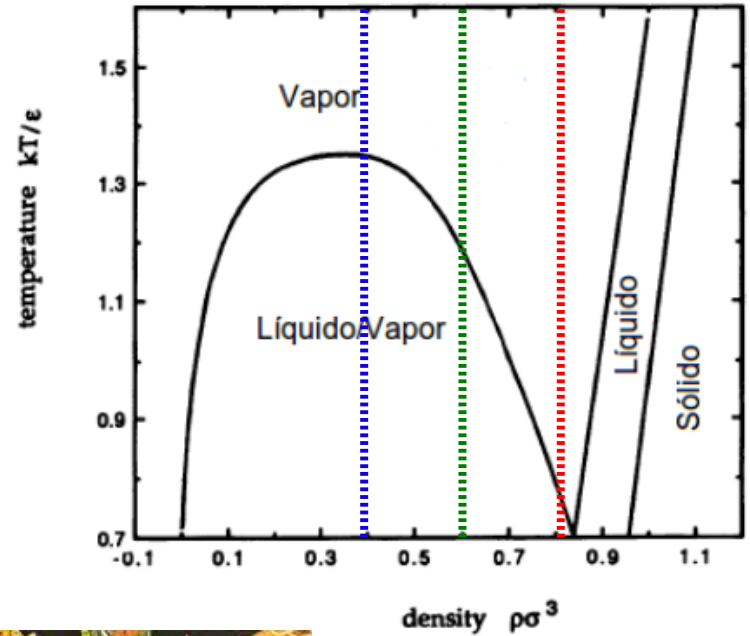
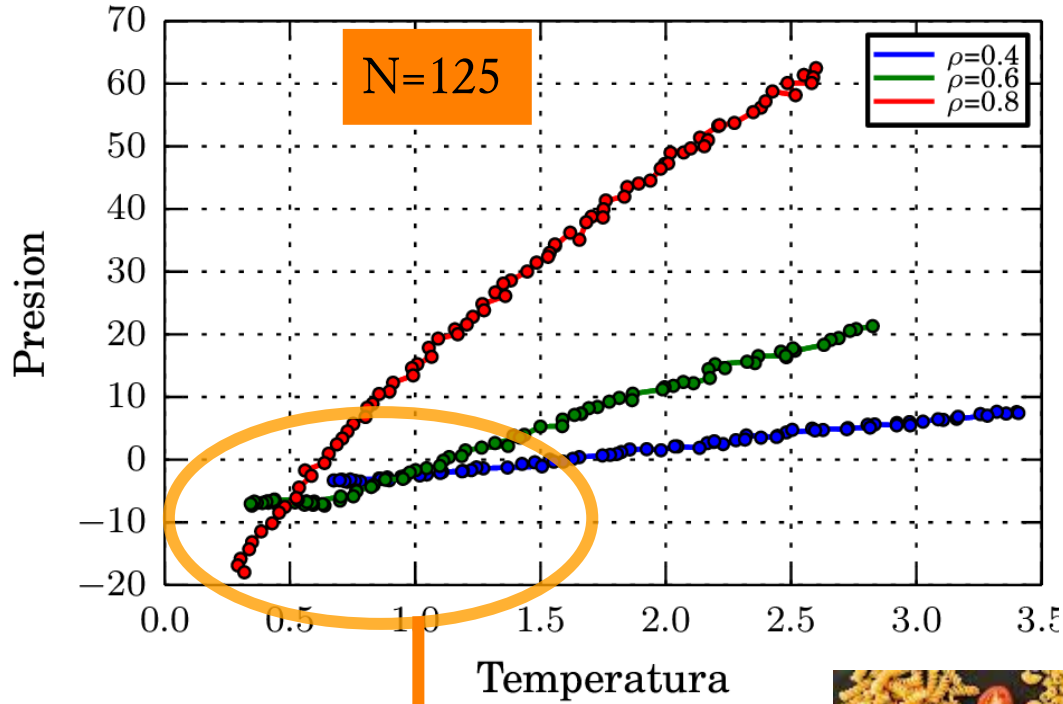
Calculamos P a cada paso (sin descorrelacionar) y hacemos un promedio temporal

```
presion_de_exceso = p/(double)(3*volumen);
```

Presión de exceso vs. Temperatura



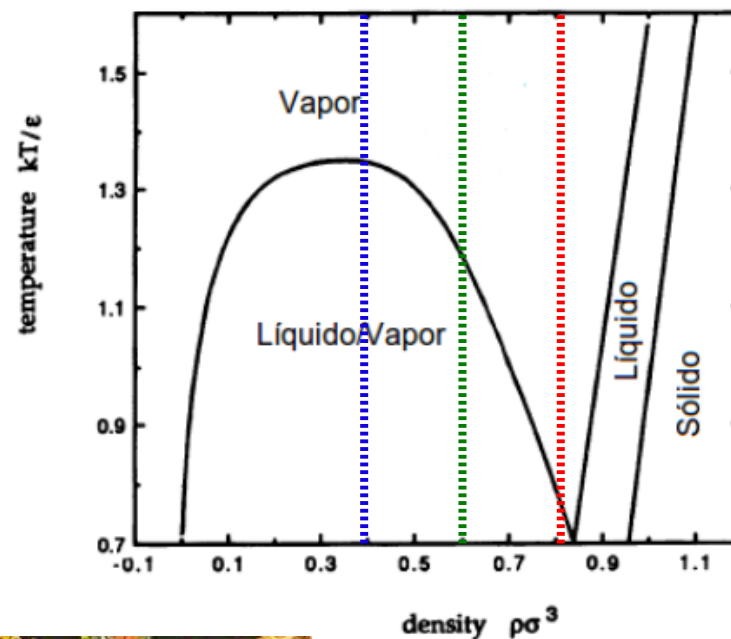
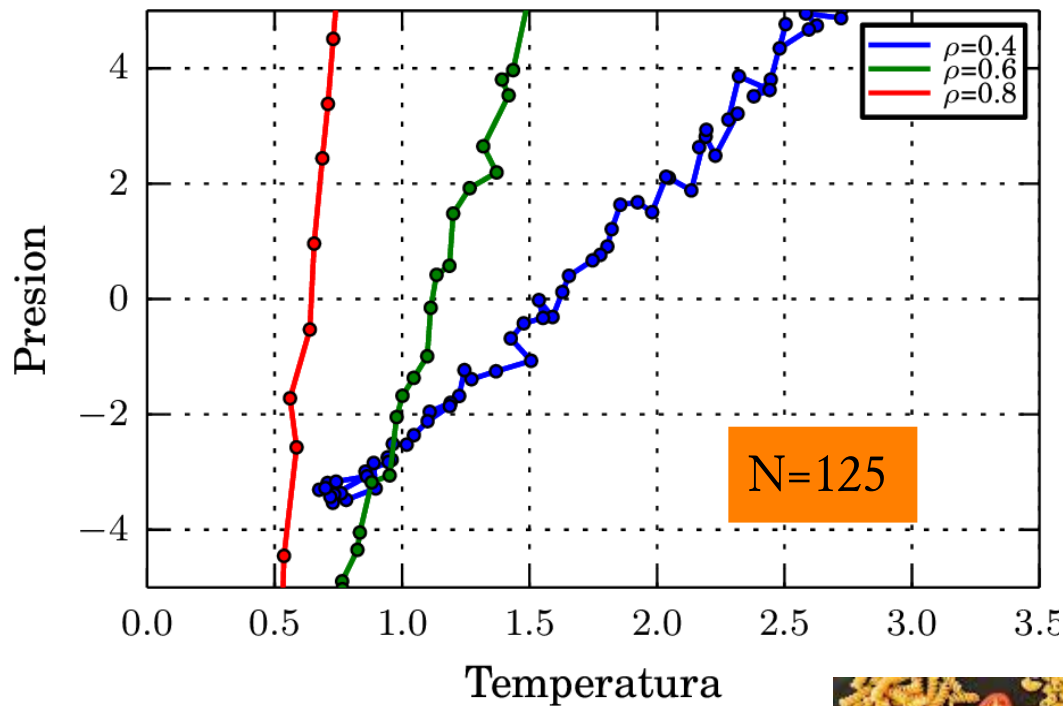
Presión vs. Temperatura



Formación de pseudo-
pastas para $p < 0$



Presión vs. Temperatura



Formación de pseudo-
pastas para $p < 0$



Función de distribución radial (la calcula VMD)

$$g(r) = \frac{\langle \delta N \rangle}{4\pi\rho r^2 \delta r}$$

donde

$$\langle \delta N \rangle = \left\langle \sum_i^N \sum_{i<j}^N \delta(r - r_{ij}) \right\rangle$$

