



Universidad de Concepción  
Dirección de Postgrado  
Facultad de Ingeniería - Programa de Magíster

## **Efectos de termostatos Berendsen y de cadenas Nosé-Hoover en dinámica molecular**

GERSON ESTEBAN VALENZUELA GONZÁLEZ  
CONCEPCIÓN-CHILE  
2011

Profesores Guía:

Pedro G. Toledo  
Dpto. de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería  
Universidad de Concepción, Concepción, Chile

Roberto E. Rozas  
Institut für Materialphysik im Weltraum  
Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt (DLR), Köln, Germany

# Resumen

El termostato de Nosé-Hoover y el de Berendsen han sido analizados respecto al efecto de sus parámetros,  $Q$  y  $\tau$  respectivamente, sobre las fluctuaciones de las energías de un sistema de partículas así como también el efecto sobre el coeficiente de autodifusión, propiedad dinámica del sistema. En tanto nada nuevo se ha descubierto respecto al termostato Berendsen y el coeficiente de autodifusión, en el caso del termostato Nosé-Hoover los resultados han conducido a una interpretación cualitativa y cuantitativa del proceso de acoplamiento entre el termostato y el sistema de partículas, interpretación de la que no hay antecedentes en la literatura.

Mediante la simulación de Argón como fluido Lennard-Jones en estado líquido se investigó la variable del termostato  $\zeta$ , que es la que controla el intercambio de energía entre el termostato y el sistema. Por medio de la transformada rápida de Fourier la variable  $\zeta$  fue descompuesta en cada una de sus componentes que se expresan como amplitudes de distinta intensidad y periodicidad. En el caso de valores bajos de  $Q$ , el espectro de amplitud muestra en forma separada las componentes oscilatorias periódicas de  $\zeta$  y las aleatorias debidas al potencial de interacción del sistema. En particular, para este límite de  $Q$ , el periodo de oscilación de la componente periódica de  $\zeta$  es menor a la aleatoria por lo que la simulación es controlada, en términos de la energía cinética, por esta solución periódica cuya consecuencia es la dependencia de la capacidad calorífica  $C_V$  del sistema con la configuración inicial de la simulación. El termostato se comporta como un sistema aislado que se mantiene oscilando solo en virtud de la configuración inicial de velocidades y posiciones de las partículas.

Un ligero incremento en el valor de  $Q$  cambia radicalmente el escenario. En el espectro de amplitud de  $\zeta$  la componente oscilatoria periódica aumenta progresivamente su periodo en tanto disminuye su amplitud acercándose a las amplitudes generadas por el potencial de interacción. Este es un proceso de acoplamiento entre el termostato y el sistema de partículas que avanza con

el incremento de  $Q$ . En este proceso las simulaciones ocurren en un tipo de transición donde la convergencia a fluctuaciones canónicas es difícil de conseguir y donde el control de temperatura es sumamente lento. Este comportamiento cualitativo ha sido descrito en la literatura por Cho y Joannopoulos [34], quienes aseguran que las simulaciones pueden converger a fluctuaciones canónicas con simulaciones sumamente extensas para  $Q$  bajo.

El acoplamiento se entiende en este análisis como la mezcla entre las distintas componentes de  $\zeta$ , con periodos de oscilación y amplitudes similares. En este escenario el valor esperado de  $C_V$  corresponde al valor esperado en el colectivo canónico y la convergencia de las fluctuaciones de energía es rápida así como también lo es el control de temperatura del termostato. Al continuar incrementando el valor de  $Q$ , el termostato cambia de comportamiento, actuando como un filtro que elimina del espectro de amplitud la componente aleatoria atribuida al potencial de interacción. En este escenario, el principal peak del espectro oscila con un periodo cuantitativamente similar al periodo de oscilación de la pseudo-partícula de Holian y Voter [24], lo que constituye una situación inadecuada para las simulaciones.

Al incorporar un segundo termostato, en lo que se conoce como cadenas Nosé-Hoover, se ha visto en los espectros de amplitud que esta construcción no modifica en ningún caso el periodo de oscilación del principal peak periódico. Aún así, el termostato integra aleatoriedad a la variable  $\zeta$  lo cual se podría ver como una mejora del termostato Nosé-Hoover, sin embargo, la aleatoriedad introducida no tiene relación con el potencial de interacción del sistema físico, constituyendo un artificio. Nuestros resultados indican que incorporar un segundo termostato no tiene ningún sentido a no ser que el primer termostato sea correctamente acoplado al sistema de partículas.