

Proyecto 2: Dinámica Molecular

SIMULACIÓN DE FENÓMEOS FÍSICOS

Dr. Enrique Pazos

7 de mayo de 2015

1. Molécula de agua

Podemos simular la estructura interna de una molécula de agua asumiendo que la energía potencial debida a la interacción de sus dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno está dada por [1]

$$E = S_1(R_2^2 - b^2)^2 + S_1(R_3^2 - b^2)^2 + S_2(\cos \theta - \cos \bar{\theta})^2. \quad (1)$$

En esta ecuación $S_1 = 94 \text{ kcal}/(\text{mol } \text{\AA}^4)$, $S_2 = 42 \text{ kcal/mol}$ son parámetros del modelo de interacción que se propone. La constante $b = 1 \text{\AA}$ es la distancia de separación de equilibrio entre el oxígeno y cada hidrógeno. El ángulo $\cos \bar{\theta} = -1/3$ es la separación de equilibrio entre los hidrógenos. Las distancias R_2 y R_3 son la posición de los hidrógenos respecto del oxígeno (ver fig. 1). El ángulo θ es la separación angular de los hidrógenos en cualquier instante de tiempo (ver fig. 2).

Este modelo nos dice que si los hidrógenos están a distancias $R_2 = R_3 = b$ y $\theta = \bar{\theta}$, entonces los átomos están en reposo respecto de sí mismos. Sin embargo, una molécula está sujeta a continuos choques con otras moléculas, por lo que adquiere energía que hace vibrar sus átomos.

La vibración de una molécula de agua la podemos simular a partir de la ec. (1). La fuerza sobre cada uno de los hidrógenos es la derivada negativa respecto de R_2 y R_3 . De esta forma, la fuerza $\mathbf{f}_{21}$ que la partícula 1 (oxígeno) ejerce sobre la partícula 2 (hidrógeno) es

$$\mathbf{f}_{21} = -4S_1R_2(R_2^2 - b^2)\hat{\mathbf{R}}_2, \quad (2)$$

donde $\hat{\mathbf{R}}_2$ es el vector unitario en la dirección de $\mathbf{R}_2 = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ y R_2 se entiende como la magnitud del vector $\mathbf{R}_2$.

De forma similar, la fuerza $\mathbf{f}_{31}$ que la partícula 1 (oxígeno) ejerce sobre la partícula 3 (el otro hidrógeno) es

$$\mathbf{f}_{31} = -4S_1R_3(R_3^2 - b^2)\hat{\mathbf{R}}_3, \quad (3)$$

en este caso $\mathbf{R}_3 = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1$.

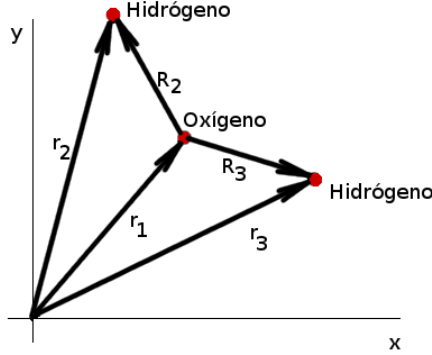


Figura 1: Posiciones

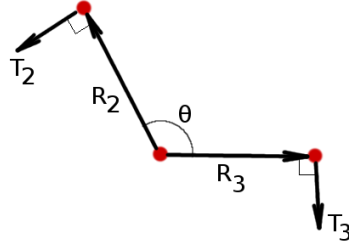


Figura 2: Vectores tangentes

Por la tercera ley de Newton, el oxígeno experimenta la misma fuerza que ejerce sobre los hidrógenos pero en dirección opuesta, por lo que la fuerza $\mathbf{f}_1$ sobre el oxígeno está dada por

$$\mathbf{f}_1 = -\mathbf{f}_{21} - \mathbf{f}_{31}. \quad (4)$$

Existen también componentes adicionales a las fuerzas anteriores que vienen del hecho de que los hidrógenos no se mueven libremente sino que vibran alrededor de un ángulo fijo $\bar{\theta}$. La magnitud f de esa fuerza la encontramos como la derivada negativa de la ec. (1) respecto de θ

$$f = 2S_2 \sin \theta (\cos \theta - \cos \bar{\theta}). \quad (5)$$

Esta fuerza actúa de forma tangencial sobre cada hidrógeno, a lo largo de los vectores unitarios $\hat{\mathbf{T}}_2$ y $\hat{\mathbf{T}}_3$ (ver fig. 2).

Por simplicidad, restringimos el movimiento de los átomos al plano xy . Con esa suposición los vectores tangentes (pero no unitarios) están dados por el producto cruz entre vectores

$$\mathbf{T}_2 = \hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{R}_2 \quad (6)$$

$$\mathbf{T}_3 = \mathbf{R}_3 \times \hat{\mathbf{z}}. \quad (7)$$

Con esto y la ec. (5) la fuerza “angular” $\mathbf{f}^a$ que experimentan las partículas 2 y 3 (hidrógenos) está dada por

$$\mathbf{f}_2^a = f \hat{\mathbf{T}}_2 \quad (8)$$

$$\mathbf{f}_3^a = f \hat{\mathbf{T}}_3, \quad (9)$$

respectivamente. El oxígeno experimentará también las mismas fuerzas pero con signo contrario, es decir, la fuerza angular $\mathbf{f}_1^a$ sobre el oxígeno está dada por

$$\mathbf{f}_1^a = -\mathbf{f}_2^a - \mathbf{f}_3^a. \quad (10)$$

De lo anterior concluimos que la fuerza total sobre cada uno de los átomos de la molécula será la suma de todas las fuerzas que hemos calculado. Si llamamos $\mathbf{F}_1$ a la fuerza total sobre el oxígeno y $\mathbf{F}_2, \mathbf{F}_3$ a la fuerza total sobre cada hidrógeno respectivamente, tenemos que

$$\mathbf{F}_2 = \mathbf{f}_{21} + \mathbf{f}_2^a \quad (11)$$

$$\mathbf{F}_3 = \mathbf{f}_{31} + \mathbf{f}_3^a \quad (12)$$

$$\mathbf{F}_1 = -\mathbf{f}_{21} - \mathbf{f}_{31} - \mathbf{f}_2^a - \mathbf{f}_3^a. \quad (13)$$

El movimiento de cada átomo lo encontramos resolviendo numéricamente la segunda ley de Newton para cada uno de ellos, es decir

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i / m_i, \quad (14)$$

donde $\mathbf{r}_i$ con $i = 1, 2, 3$ es la posición de cada uno de los átomos. Las masas están en unidades atómicas, por lo tanto, para el oxígeno $m_1 = 16$ y para los hidrógenos $m_2 = m_3 = 1$.

2. Proyecto

El proyecto consiste en simular una molécula de agua de acuerdo a las interacciones descritas en la sección anterior. Para simplificar el modelo consideraremos una molécula bidimensional, es decir que los vectores tienen componentes únicamente en el plano xy .

La presentación consiste en hacer una película de por lo menos 10 segundos de duración, mostrando cómo vibra la molécula para un conjunto de condiciones iniciales.

Todas las películas serán presentadas el día del examen final ante todos los estudiantes del curso.

3. Evaluación

La evaluación de acuerdo a la completitud del modelo se hará de la siguiente forma.

O-H con potencial armónico	50 puntos
H-O-H con potencial armónico	75 puntos
H-O-H con potencial armónico y angular	100 puntos

El aspecto estético, visual y artístico se decidirá entre los estudiantes quienes votarán para elegir la mejor película.

Referencias

- [1] Schlick & Figueroa, *A molecular dynamics simulation of a water droplet by the implicit-Euler/Langevin scheme*, J. Chem. Phys. **94** (3), 1 February 1991