

Procesamiento automatizado de datos generados mediante Dinámica Molecular[§]

Justo Rojas^{1,2,*}, Iván Lobato¹

¹ Instituto Peruano de Energía Nuclear. Departamento de Física. Av. Canadá N° 1470, Lima 41, Lima, Perú.

² Universidad Nacional Mayor de San Marcos. Facultad de Ciencias Físicas, Av. Venezuela s/n, Lima 14, Perú

Resumen

Se presenta una nueva herramienta integrada de procesamiento automatizado de datos generados por paquetes o programas de dinámica molecular. El programa permite calcular importantes magnitudes como la función de correlación par, los índices mediante la técnica de análisis de vecinos comunes, conteo de nanopartículas y su distribución por tamaño, conversión de archivos entre diferentes formatos. En este trabajo se describe en detalle los módulos de la herramienta, la interconexión entre las mismas, se ilustran sus usos en ejemplos de aplicación en el cálculo de diversas propiedades de nanopartículas de plata.

Abstract

A new integrated tool for automated processing of data generated by molecular dynamics packages or programs has been developed. The program allows calculation of important values such as, pair correlation function, indexes through common neighbor analysis technique, counting of nanoparticles and its size distribution, file conversion among different formats. It is given detailed description of the modules and its interconnection as well as some examples of applications to calculate different properties of silver nanoparticles.

1. Introducción

En años recientes se han realizado investigaciones extensivas para entender el comportamiento de los materiales a escala nanométrica, principalmente al estudio de las nanopartículas. La dinámica molecular (DM) es una de las técnicas de simulación más usadas para obtener información detallada de los nanomateriales a nivel atómico [1-4].

Existen diferentes programas de simulación basados en la dinámica molecular (LAMMPS, XMD, Moldy, etc.), los cuales generan datos en diferentes formatos de salida (Cor, Pdb, Pos). Por ejemplo, los archivos de tipo Cor, generados mediante XMD, son archivos binarios en donde se guardan para cada paso de DM indicado, el número de átomos, las dimensiones de la caja, las coordenadas y velocidades de todos los átomos. Una de las tareas que consume bastante tiempo consiste en el tratamiento de gran cantidad de datos. Cada una de los mencionados paquetes incluye algunos programas utilitarios aislados, generalmente

diseñados para el caso de sistemas continuos o macizos.

En el Instituto Peruano de Energía Nuclear se desarrolla el programa CMD para realizar el tratamiento automatizado de datos de diferentes formatos de entrada (*.Cor, *.Pdb, *.Pos, *.e, *.b) con el objetivo de acelerar la investigación en el campo de estudio de los nanomateriales. En el presente trabajo se presenta la primera versión del programa, el cual se irá mejorando sobre la base de los comentarios y sugerencias de los posibles usuarios. El código fuente fue escrito en Delphi.

2. Descripción

El programa *CMD* tiene una interface gráfica bastante amigable para el usuario y está estructurada en forma de módulos independientes que aparecen en el menú principal.

* Correspondencia autor: jrojas@ipen.gob.pe

2.1 Módulo Count

Este módulo permite obtener las propiedades estadísticas como el número y tamaño de las nanopartículas contenidas dentro de la caja de simulación. La Figura 1 ilustra el cálculo del tamaño de una nanopartícula de Ag que consta de 2869 átomos a diferentes temperaturas.

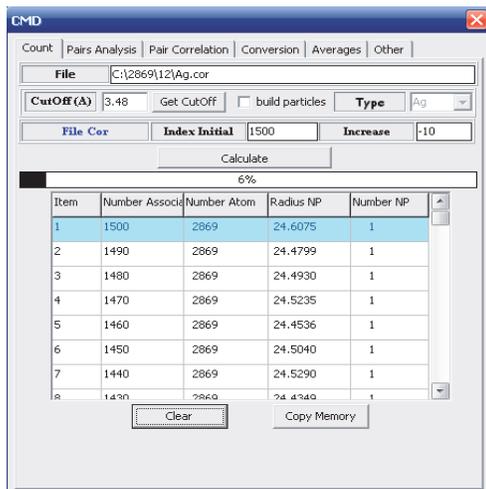


Figura 1. Captura de la ventana durante la ejecución del módulo *Count*.

Parámetros de entrada

File: Se escoge el tipo de archivo de entrada (*.Cor, *.Pdb, *.Pos).

CutOff: Máxima distancia (en angstroms) en la cual se considera que existe enlace entre dos átomos.

Build Particles: Si esta opción está marcada se crea un archivo Pdb, después de la reconstrucción de las nanopartículas en las fronteras, ver Figura 2b.

Type: Se añade los elementos químicos, para la reconstrucción de archivo Pdb. Esta opción se activa cuando la opción *Build Particles* está marcada.

Index Initial, Increase: Solamente activo para los archivos Cor. Sirve para la asociación de un número para cada configuración en el archivo de tipo Cor.

Botones de ejecución

Get CutOff: Usado para seleccionar un tipo de archivo Pos o Pdb, del cual se obtendrá la distancia de enlace.

Calculate: Ejecuta el algoritmo necesario para el cálculo del radio medio, número de partículas promedio.

Clear: Borra los elementos de la tabla.

Copy memory: Copia los elementos de la tabla a memoria.

Datos de Salida

Number Associate: Es el número asociado a una configuración del archivo Cor.

Number Atom: Número de átomos promedio de las nanopartículas.

Radius NP: Radio promedio de las nanopartículas.

Number NP: Número total de las nanopartículas.

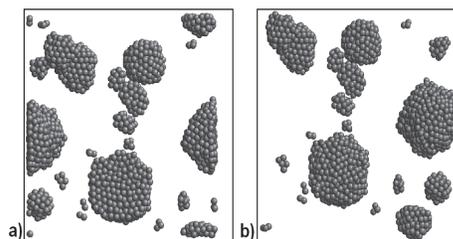


Figura 2. a) Visualización de entrada de un archivo Pdb de las posiciones de los átomos en las nanopartículas, b) Nanopartículas reconstruidas en las fronteras de la caja.

La Figura 2 ilustra el proceso de reconstrucción de las nanopartículas, obtenidas en las simulaciones utilizando condiciones de frontera periódica.

En las Figuras 3 y 4 se muestran ejemplos de cálculo del número y tamaño de las nanopartículas de Ag que se forman durante el enfriamiento a partir de la fase gaseosa a diferentes condiciones, respectivamente.

2.2 Módulo Pair Analysis

Aquí se encuentran las opciones necesarias para calcular los índices característicos de las estructuras FCC, BCC, icosaedricas, etc. mediante la técnica de análisis de pares desarrollada por Honeycutt y Anderson [5,6].

Parámetros de entrada

File: Solicita ruta y nombre del archivo de entrada, que puede ser del tipo (*.cor, *.pdb, *.pos) y contener una o más configuraciones.

CutOff y Index Initial, Increase: Tienen el mismo significado que en el módulo *Count*.

Index: Se coloca el índice que desea extraer para una o diferentes configuraciones.

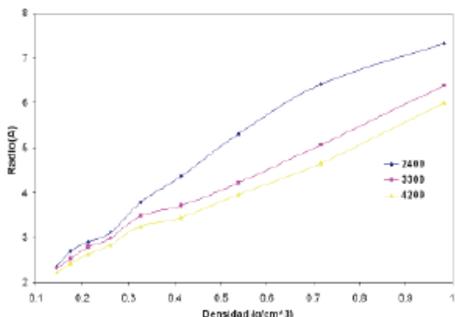


Figura 3. Gráfico de salida obtenidas con el programa CMD de un archivo Cor, en la cual se grafica en número de las nanopartículas de Ag formadas después del enfriamiento como función de la densidad a partir de diferentes temperaturas.

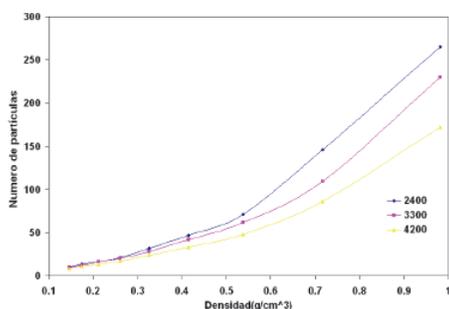


Figura 4. Gráfica de salida obtenidas con el programa CMD de un archivo Cor, en la cual se grafica el radio promedio de las nanopartículas de Ag formadas después del enfriamiento para diferentes densidades y temperaturas.

Botones de ejecución

Get CutOff: Igual significado que en el módulo *Count*

Calculate all indexes: Busca y calcula todos los índices de pares del archivo de entrada.

Extract Index: Extrae el índice respectivo para una o diferentes configuraciones.

En la Figura 5 se ilustra el cálculo, a partir del archivo Ag.cor, de todos los índices de la nanopartícula correspondientes a temperaturas desde 1500 K hasta 300 K con un incremento de -10 K.

Datos de Salida

Al ejecutar *Calculate all indexes* el programa genera una carpeta con el nombre “**Index vs Temperature**” en el mismo directorio del archivo seleccionado en la cual genera archivos de salida con extensión IND, que contienen todos los índices para cada configuración de entrada (cada temperatura).

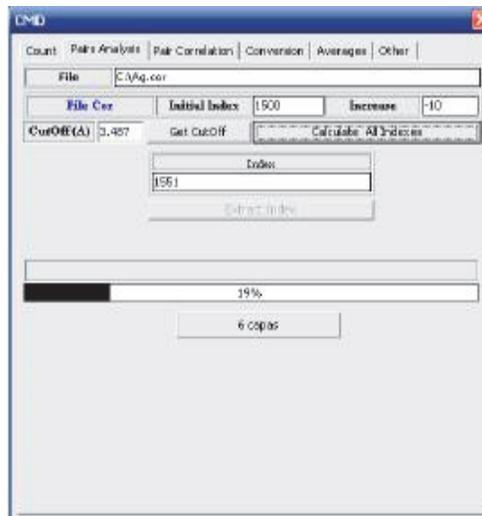


Figura 5. Captura de la ventana con el módulo Pair Analysis ejecutándose.

Al ejecutar *Extract Index* el programa genera una carpeta con el nombre “**Index principal**” en el mismo directorio del archivo seleccionado en la cual guarda archivos de salida con extensión INDTEMP, con los índices principales (escogidos) como función de la temperatura.

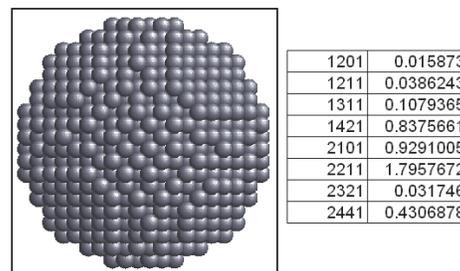


Figura 6. Índices obtenidos con el programa CMD de un archivo Pdb para el caso de una nanopartícula de 2112 átomos.

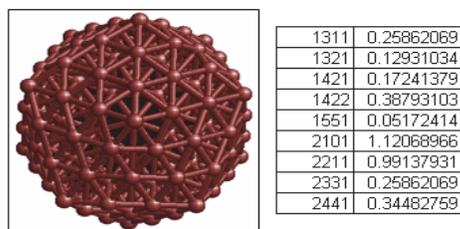


Figura 7. Radio promedio de los clusters como función de la densidad del gas.

Las Figuras 6 y 7 muestran dos nanopartículas de diferentes morfologías (FCC e Icosaedral, respectivamente) para los cuales se han calculado todos los índices y sus respectivas poblaciones. En la tabla al costado de las imágenes se presentan los valores de algunos de los más representativos índices.

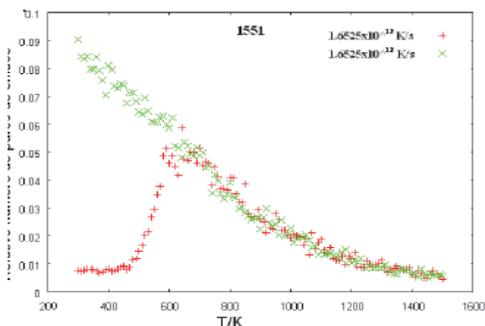


Figura 8. Variación de número relativo de los índices 1551 (+ $K_1 = 1.6525 \times 10^{12}$ K/s, x -- $K_2 = 1.6525 \times 10^{13}$ K/s).

En la Figura 8 se presenta la variación con la temperatura del índice 1551 (característica de la simetría icosaedral) en la nanopartícula de plata enfriada con dos velocidades diferentes, mientras que la Figura 9 muestra la variación del índice 1421 (característica de la estructura FCC).

2.3 Módulo Pair Correlation

Este módulo está diseñado para el cálculo de la función de correlación par $g(r)$ [3] de cualquier configuración atómica. Puede calcular el $g(r)$ en forma separada de las partes interna y externa de la nanopartícula. En la Figura 10 se ilustra el proceso de cálculo de $g(r)$ de la nanopartícula a diferentes temperaturas.

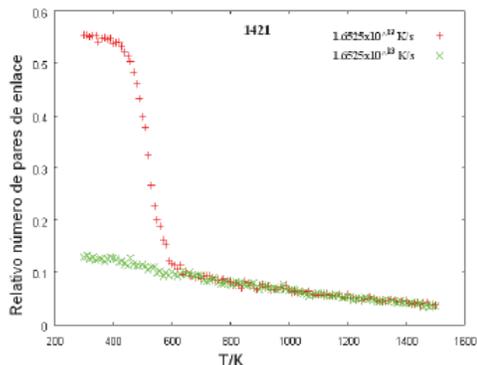


Figura 9. Variación de número relativo de los índices 1421 (+ $K_1 = 1.6525 \times 10^{12}$ K/s, x -- $K_2 = 1.6525 \times 10^{13}$ K/s).

Parámetros de entrada

File: Solicita el nombre y ruta del archivo de entrada de tipo (*.Cor, *.Pdb, *.Pos).

Radius Initial: Distancia inicial a partir del cual comienza el cálculo de $g(r)$.

Radius End: Distancia final hasta donde se extiende el cálculo de $g(r)$.

N. of Shell: Número total de divisiones entre el radio inicial y final.

Surface X, Y, Z: Esta opción activa o desactiva las condiciones de frontera periódica del Box para el cálculo de la función de correlación par.

Index Initial, Increase: Solamente activo para los archivos Cor. Sirve para la asociación de un número para cada configuración en el archivo Cor.

OneNanoparticle: Se activa esta opción para hallar la correlación par de la parte interna y total.

Percentage: Esta opción indica la forma de separar la parte interna de la partícula (en porcentaje del radio o en un valor dado).

Radius Inner: Se ingresa el porcentaje respecto al radio o un valor en nanómetros, dependiendo si *Percentage* es activado o no.

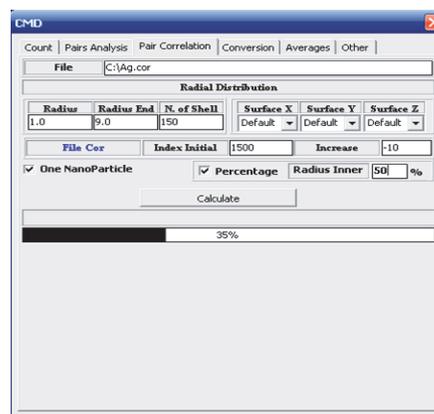


Figura 10. Captura de la ventana con el módulo *Pair correlation* en ejecución.

Botones de ejecución

Calculate Obtiene la correlación par de una o varias configuraciones dadas.

Datos de Salida

Al ejecutar *Calculate* el programa genera una carpeta con el nombre "Pair Correlation" en el mismo directorio del archivo seleccionado en la cual guarda archivos de salida con

extensión gr, para cada configuración de entrada.

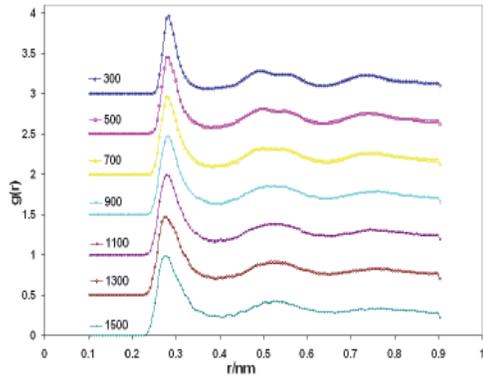


Figura 11. Las funciones de correlación par de una nanopartícula correspondientes a diferentes temperaturas durante el proceso de enfriamiento con velocidad $1.6525 \times 10^{13} \text{K/s}$.

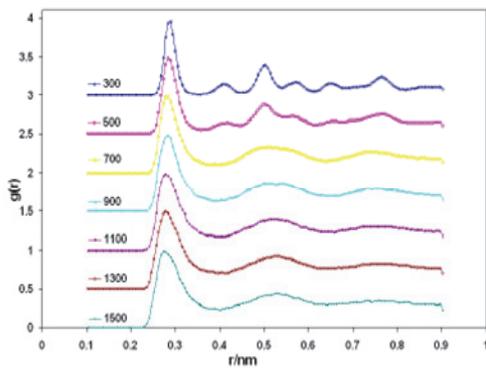


Figura 12. Las funciones de correlación par de una nanopartícula correspondientes a diferentes temperaturas durante el proceso de enfriamiento con velocidad $1.6525 \times 10^{12} \text{K/s}$.

2.4 Módulo Averages

Aquí se encuentran las opciones necesarias para obtener el promedio de cualquier columna de una serie de datos. La Figura 13 ilustra el proceso de cálculo de los promedios de las energías total, potencial y cinética para diferentes temperaturas.

Parámetros de entrada

File: Admite cualquier tipo de archivo de datos organizado en columnas.

Col X: Se ingresa la columna de la serie de datos con respecto al cual se va a promediar.

Inicial Col: Dato de la columna X desde la cual se comenzara a promediar las otras columnas.

End Col: Dato de la columna X hasta la cual se promediará las otras columnas.

Increase: Es el incremento en la cual se desplazará *Inicial Col* y *End Col* para promediar las otras columnas.

Inicial X: Valor asociado a *Inicial Col*.

End X: Valor asociado a *End Col*.

Increase X: Es el incremento en la cual se desplazara *Inicial X* y *End X* al promediar las otras columnas.

Col A, Col B, Col C: Columnas a promediar respecto a la columna X.

Operation A, Operation B, Operation C: Se realiza una operación sobre una determinada columna.

Factor A, Factor B, Factor C: Es el factor que realizara la respectiva operación asignada.

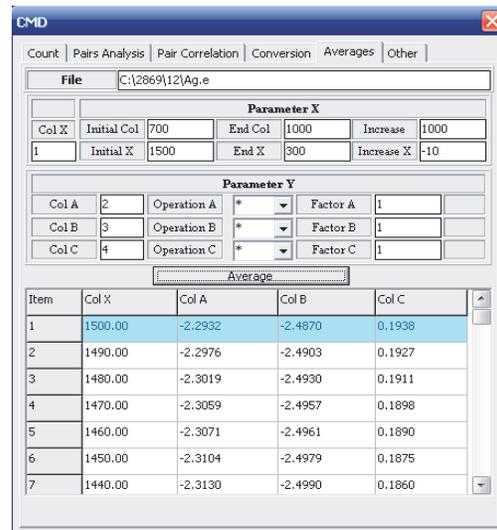


Figura 13. Captura de la ventana con el módulo Averages en ejecución.

Botones de ejecución

Average: Obtiene el promedio de la columna A, B, C de los datos.

Datos de Salida

Al ejecutar *Average* el programa genera un archivo de salida con extensión *Ave*, en la cual se encuentra el promedio de las columnas A, B, y C asociados a un valor de la columna X.

En la Figura 14 se presenta un ejemplo de cálculo de de los valores medios de la energía total de la nanopartícula correspondientes a diferentes temperaturas, obtenida con la ayuda del módulo *Average*.

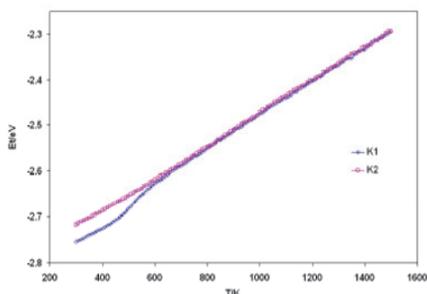


Figura 14. Variación de la energía total versus temperatura de las nanopartículas de Ag correspondientes a 2 velocidades de enfriamiento ($K_1 = 1.6525 \times 10^{12} \text{ K/s}$, $K_2 = 1.6525 \times 10^{13} \text{ K/s}$).

2.5 Módulo Conversión

Diseñada con la finalidad de conversión entre archivos Cor, Pos, Pdb. En la Figura 15 se muestra un ejemplo de conversión de archivos tipo Cor a Pdb.

Parámetros de entrada

Conversión de Cor a Pdb, Pos

Cor File: Se escoge un archivo de entrada tipo Cor.

Pdb, Pos: Tipo de archivo de salida.

Type: Se añade los símbolos de los

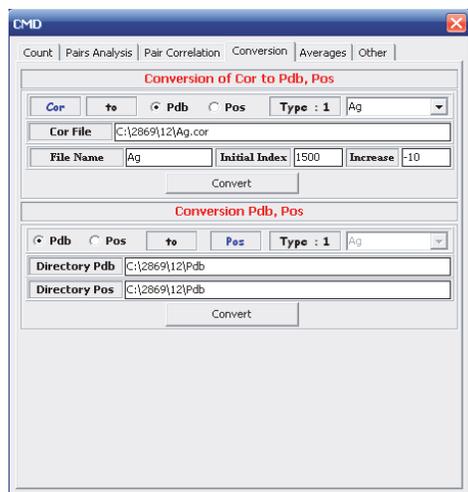


Figura 15. Captura de la ventana de ejecución del módulo **Conversión**.

elementos químicos, para la reconstrucción de archivo Pdb.

Filename: Nombre de los archivos de salida (Pos, Pdb).

Index Initial, Increase: Sirve para la asociación de un número para cada configuración en el archivo Cor.

Conversión Pdb, Pos

Directory Pdb: Se escoge la carpeta donde se encuentran o se almacenaran los archivos Pdb.

Directory Pos: Se escoge la carpeta donde se encuentran o se almacenaran los archivos Pos.

Pdb, Pos: Tipo de archivo de entrada.

Type: Se añade los elementos químicos, para la reconstrucción de los archivos Pdb.

Datos de Salida

Al ejecutar *Conversion* el programa crea una carpeta con el nombre dependiendo del tipo de archivos (**Pos**, **Pdb**) y sus respectivos archivos de salidas correspondiente a la conversión.

4. Conclusiones

Se ha logrado desarrollar una herramienta muy útil de procesamiento automatizado de datos generados por programas de dinámica molecular. El utilitario es un programa modular interactivo con interface gráfica amigable y permite operar con diferentes tipos de datos como Cor, Pdb, Pos, XYZ, text. Los módulos utilitarios, principalmente el de análisis de pares y función de correlación par, permiten economizar sustancialmente el tiempo de procesamiento al permitir, por ejemplo, calcular las magnitudes de interés secuencialmente para diferentes valores de temperatura.

5. Referencias

- [1]. Binder K, Horbach J, Kob W, Paul W, Varnik F. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2004; 16:5429-5453
- [2]. Duan Wen S, Ming L, Ling Guang H, Lin KH. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2008; 16: 025009.
- [3]. Chen M, Guo Z, Han XJ. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2004; 16:705-713.
- [4]. Lumen N, Kraska T. *Nanotechnology.* 2005; 16:2870-2877.
- [5]. Honeycut JD, Anderson HC. *J. Phys. Chem.* 1987; 91:4950.
- [6]. Jonsson H, Anderson HC. *Phys. Rev. Lett.* 1988; 60:2295.

§ Publicado en la Rev. Inv. Fís. 2008 dic; 11(1):43-48.