

PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

Sistemas Autoensamblables: Un estudio con dinámica molecular y Monte Carlo

OBJETIVOS A CUMPLIR

- Estudiar las propiedades dinámicas de partículas autoensamblables en 2D y 3D, utilizando un modelo de potencial continuo de pozo cuadrado con simulaciones de dinámica molecular.
- Estudiar y modelar las propiedades estáticas de nanopartículas tipo core-corona en geometrías cilíndricas utilizando simulaciones de Monte Carlo.
- Construir el diagrama de fase de cristales líquidos modelados con el potencial de Gay-Berne, mediante simulaciones de dinámica molecular.
- Construir el diagrama de fase de cristales líquidos en 2D como función de la dureza del potencial y modelados con Gay-Berne, mediante simulaciones de dinámica molecular.
- Estudiar las propiedades dinámicas y ópticas partículas elipsoidales en 2D.
- Modelar nanoclusters moleculares mediante simulaciones de dinámica molecular.
- Formar recursos humanos en áreas científicas afines al supercómputo.

PRODUCTOS ACADÉMICOS A OBTENER

- Un artículo de investigación en el tema del autoensamblado de partículas decoradas en la superficie en revistas internacionales indizadas y con arbitraje.
- Un artículo de investigación relacionado con partículas elipsoidales, para su publicación en revistas internacionales indizadas y con arbitraje.
- Presentación de los resultados obtenidos en congresos nacionales e internacionales relacionados con la Materia Condensada Blanda.
- Presentación de pláticas de divulgación científica en instituciones educativas y de investigación, tanto nacionales como internacionales, y en diversos medios de comunicación.
- Formación de recursos humanos mediante tesis ya sea de doctorado, maestría o licenciatura de los alumnos involucrados dentro del proyecto.

RECURSOS DE SUPERCÓMPUTO REQUERIDOS

Las demandas computacionales del presente proyecto de investigación, en el cual se utilizarán códigos de dinámica molecular que están implementados con MPI y códigos de Monte Carlo, requieren del número de horas de CPU anuales estipulados en la modalidad de **Proyecto de Investigación Regular** (510,000 horasCPU) y el uso de 512 procesadores por proceso computacional. El espacio en disco duro que se requiere para estudiar y analizar las propiedades estáticas y dinámicas de los sistemas autoensamblables es de 5TB. La cantidad de memoria RAM que nuestros códigos de dinámica molecular demandan, usando las bibliotecas de paso de mensajes, son las que los nodos traen de configuración. Los compiladores que requieren los códigos de dinámica molecular en MPI son FORTRAN90, OpenMPI y MPI. Haremos uso de las bibliotecas de CUDA. Para este último punto se requiere el uso de los GPU de Miztli (tarjetas NVIDIA Tesla).

FUNDAMENTACIÓN

Las líneas de investigación del presente proyecto dan continuidad al trabajo realizado en el proyecto aprobado en la convocatoria 2016, titulado “Simulaciones de dinámica molecular y Monte Carlo de nanosistemas, cristales líquidos, coloides y clusters moleculares”.

En relación con el objetivo de estudiar las propiedades dinámicas de partículas autoensamblables en 2D y 3D, utilizando un modelo de potencial continuo de pozo cuadrado con simulaciones de dinámica molecular, podemos decir que este tipo de potencial ha sido de utilidad en el estudio de las propiedades interfaciales de mezclas mediante simulaciones de Monte Carlo [1]. Nuestro objetivo es conocer la dinámica del autoensamblado de partículas que interactúan vía este potencial, cuando se encuentran en bulto y cuando se encuentren confinadas en superficies.

En relación con el objetivo de estudiar y modelar las propiedades estáticas de nanopartículas tipo core-corona en geometrías cilíndricas utilizando simulaciones de Monte Carlo, nos interesa determinar qué tipo de patrones exhiben dichas partículas cuando se encuentran confinadas a una geometría cilíndrica, debido a su posible aplicación en las industrias de circuitos eléctricos y de polímeros. El potencial de interacción core-corona considera a las nanopartículas como constituidas por una esfera dura en su centro y una corona suave, que permite un cierto grado de traslape entre ellas [2]. Debido a que buscamos obtener las estructuras de equilibrio utilizaremos simulaciones de Monte Carlo.

Respecto a los objetivos de Construir el diagrama de fase de cristales líquidos modelados con el potencial de Gay-Berne en 2D, mediante simulaciones de dinámica molecular, Construir el diagrama de fase de cristales líquidos en 2D como función de la dureza del potencial y modelados con Gay-Berne, mediante simulaciones de dinámica molecular y Estudiar las propiedades dinámicas y ópticas partículas elipsoidales en 2D, seguimos interesados en estudiar las propiedades de partículas que interaccionan con dicho potencial confinadas a superficies, para determinar las fases y transiciones de fases que las caracterizan en base al conocimiento que tenemos de las mismas en 3D y en confinamiento, y sus posibles aplicaciones en biosensores [3,4].

En relación al objetivo de Modelar nanoclusters moleculares mediante simulaciones de dinámica molecular, seguimos interesados en el estudio de las propiedades fisicoquímicas de sistemas pequeños [5,6], dado que estos sistemas han tenido un interés creciente debido la posibilidad de realizarlos experimentalmente [7-9]. Hasta ahora hemos implementado la dinámica molecular de nanoclusters con CUDA, utilizando potenciales tipo Lennard-Jones. Además de optimizar dicha dinámica, queremos implementar otro tipo de potenciales como los que describen la interacción entre las partículas de agua [10], con el fin de estudiar las propiedades termodinámicas y morfológicas de dichos sistemas, y para poder hacer comparaciones con mediciones reportadas en la literatura.

DESCRIPCIÓN DE LOS PROCESOS COMPUTACIONALES A REALIZAR

Los programas de dinámica molecular que usaremos para cumplir los objetivos propuestos están codificados en FORTRAN (FORTRAN90) y usando bibliotecas de paso de mensajes (MPI). Las pruebas de escalamiento (speedup) realizadas a nuestros códigos, los cuales fueron programados por los propios investigadores, muestran una gran eficiencia (95%) hasta con 4096 procesadores. Los procesos computacionales que se llevarán a cabo, consistirán en estudiar los sistemas anisótropos cambiando las características moleculares como función de la temperatura del sistema, para así obtener las propiedades estáticas y dinámicas.

En la determinación de los diagramas de fase las propiedades dinámicas y ópticas, para los distintos sistemas de estudio se utilizarán códigos de dinámica molecular y Monte Carlo tanto seriales como paralelos en Fortran90.

Se hará uso de bibliotecas de CUDA en los códigos desarrollados de dinámica molecular en GPUs.

PARTICIPANTES

Dr. Saúl Iván Hernández Hernández, Profesor Asociado C, T.C., UMDI-Juriquilla, Facultad de Ciencias, UNAM

Dr. José Antonio Moreno Razo, Profesor Investigador Titular C, T.C., Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

Dr. Jesús Enrique Díaz Herrera, Profesor Investigador Titular C, T.C., Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

Dr. Juan Andrés Reyes Nava, Investigador de Tiempo Completo Titular C, Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas

Dr. Abelardo Ramírez Hernández, Investigador Posdoctoral, Argonne National Laboratory, The University of Chicago

Estudiantes de Maestria:

M.C. Javier Ortíz Torres, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

Ing. Bio. José Luis Prado Arroyo, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

F. Aurora Denisse González Martínez, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

F. Yonatan Aldana Saldaña, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

Estudiantes de Licenciatura:

Reyna Esthela Silva Salazar, Facultad de Ciencias, UNAM

José Antonio Luna Kuri, Facultad de Ciencias, UNAM

Benjamín Tenopala Carmona, UMDI-Juriquilla, UNAM

Eric Villafuerte Morquecho, Universidad Autónoma de Querétaro

Juan Germán Caltzontzin Rabell, Universidad Autónoma de Querétaro

Pedro Pablo Ramírez Martínez, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

Anna Monserrat Alarid Gutierrez, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

Natalia Castillo Mendoza, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

BIBLIOGRAFÍA

- [1] F. J. Martínez-Ruiz and F. J. Blas, Interfacial properties of binary mixtures of square-well molecules from Monte Carlo simulation, *J. Chem. Phys.* (2016) DOI: 10.1063/1.4947017
- [2] C. I. Mendoza and E. Batta, Self-assembly of binary nanoparticle dispersions: From square arrays and stripe phases to colloidal corrals, *EPL* 85 56004 (2009).
- [3] S.I. Hernández, J.A. Moreno-Razo, A. Ramírez-Hernández, E. Díaz-Herrera, J.P. Hernández-Ortiz, J.J. de Pablo, Liquid crystal nanodroplets, and the balance between bulk and interfacial interactions, *Soft Matter* 8, 1443-1450 (2012)
- [4] V. Tomar, S.I. Hernández, N. Abbott, J.P. Hernández-Ortiz, J.J. de Pablo, Morphological transitions in liquid crystal nanodroplets, *Soft Matter* 8, 8679-8689 (2012)
- [5] I. Santamaría-Holek, A. Pérez-Madrid, Thermostatistical description of small systems in nonequilibrium conditions: Energy conversion and harvesting, *Physical Review E* 89, 012144 (2014)
- [6] Michaelian, K., I. Santamaria Holek, Critical Analysis of Negative Heat Capacity in Nanoclusters, *Europhys. Lett.*, 79, 43001 (2007)
- [7] M. Schmidt, A. Masson, C. Bréchnignac and H-P Cheng, Hydrogen peroxide and ammonia on protonated ice clusters, *J. Chem. Phys.* 126, 154315 (2007)
- [8] C. Hock, M. Schmidt, R. Kuhnen, C. Bartels, L. Ma, H. Haberland, and B. v.Issendorff, Calorimetric Observation of the Melting of Free Water Nanoparticles at Cryogenic Temperatures, *Phys. Rev. Lett.* 103, 073401 (2009)
- [9] M. Schmidt and B. von Issendorff, Gas-phase calorimetry of protonated water clusters, *J. Chem. Phys.* 136, 164307 (2012)
- [10] J. Alejandre, D. J. Tildesley and G. A. Chapela, Molecular dynamics simulation of the orthobaric densities and surface tension of water, *J. Chem. Phys.* 102, 4574 (1995)