

# Modelación computacional en Nanociencias

Camilo Espejo, PhD  
Departamento de Ciencias  
Básicas-MM&S  
Universidad de Bogotá Jorge  
Tadeo Lozano

# Outline

## ▫ Nanociencia y Nanotecnología

¿Qué se requiere para modelar la materia desde primeros principios?

Mecánica clásica Vs mecánica cuántica

- *Need for speed* → **DFT**
- Algoritmos básicos
- Algunos ejemplos
- Proyectos

# Nanociencia y Nanotecnología

Ciencias: Física, Química, Biología

Nano → 0.000000001

Nanociencias: nanofísica, nanoquímica,  
nanobiología

En la escala nanométrica tenemos “pocos”  
átomos

# ¿Qué determina la estructura de la materia?

- Moléculas pequeñas:  
Movimiento de los electrones (Mecánica cuántica)  
Átomos, moléculas
- Macromoléculas: Interacciones de corto alcance + Interacciones de largo alcance (“no intercambio de e-): H-Bonds, van der Waals.
- Sólidos: Todo lo anterior + condiciones de frontera periódicas

# Fenómenos de origen cuántico

- Dualidad onda-partícula:  
Delocalización, interferencia, difracción.
- Cuantización de la energía.
- Efecto tunel.
- Superposición de estados.
- Enredamiento cuántico.

# Dualidad onda-partícula

- <http://www.toutestquantique.fr/#dualite>

$$\text{Kinetic Energy} + \text{Potential Energy} = E$$

Classical  
Conservation of Energy  
Newton's Laws

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E$$

Harmonic oscillator example.

$$F = ma = -kx$$

Quantum  
Conservation of Energy  
Schrodinger Equation

In making the transition to a wave equation, physical variables take the form of "operators".

The energy becomes the Hamiltonian operator

$$H\Psi = E\Psi$$

Wavefunction

Energy "eigenvalue" for the system.

The form of the Hamiltonian operator for a quantum harmonic oscillator.

$$H \rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

$p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$   
 $x \rightarrow x$

# Ecuación de Schrödinger



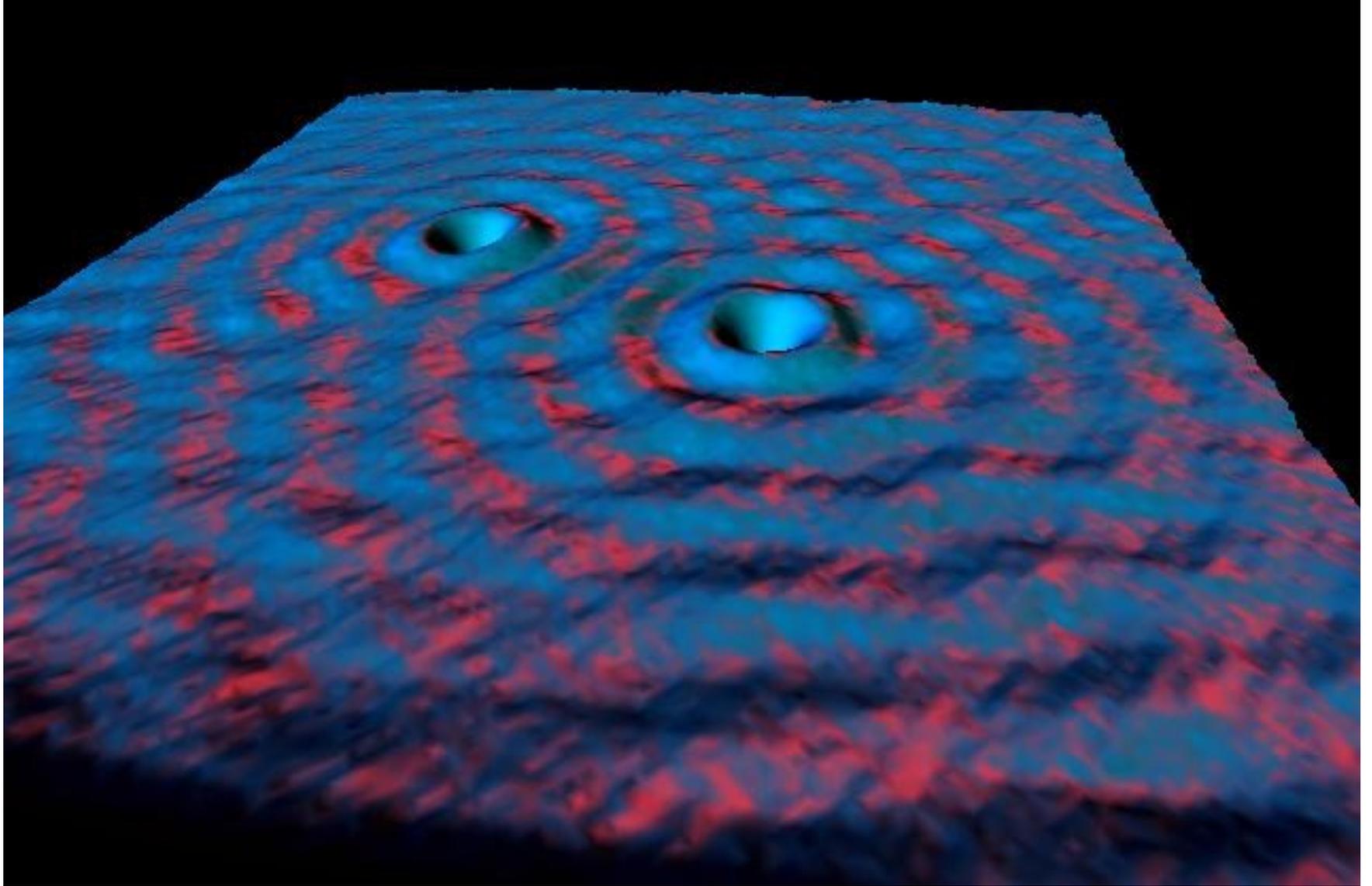
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x, y, z) \psi$$

$$\text{Con } \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

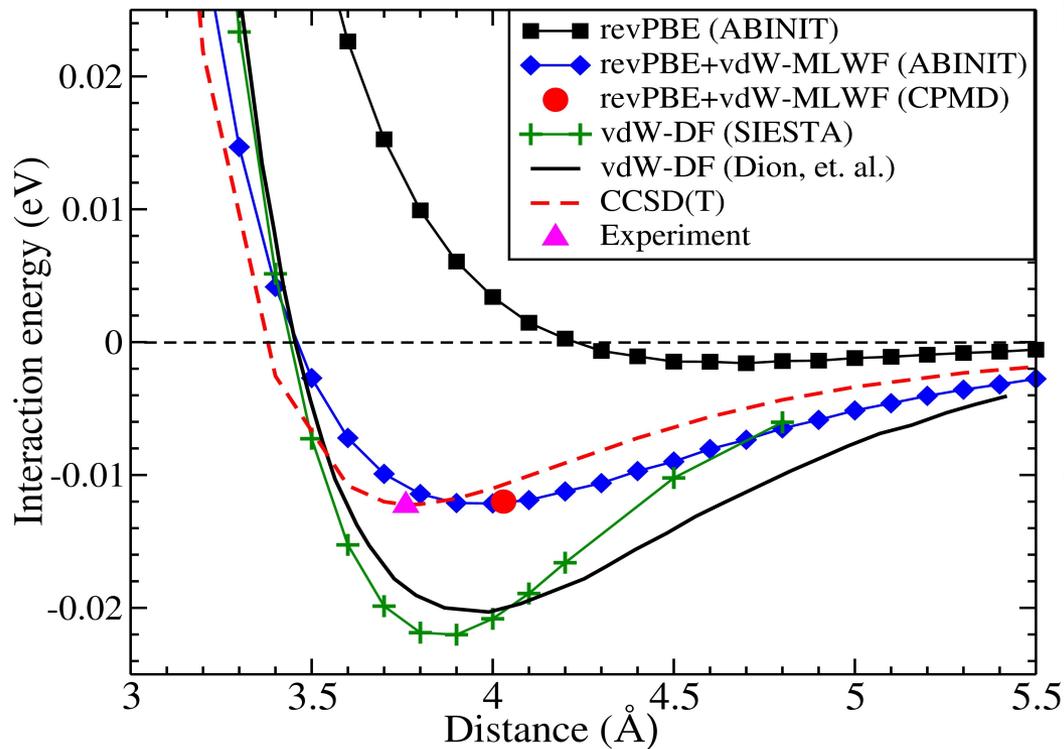
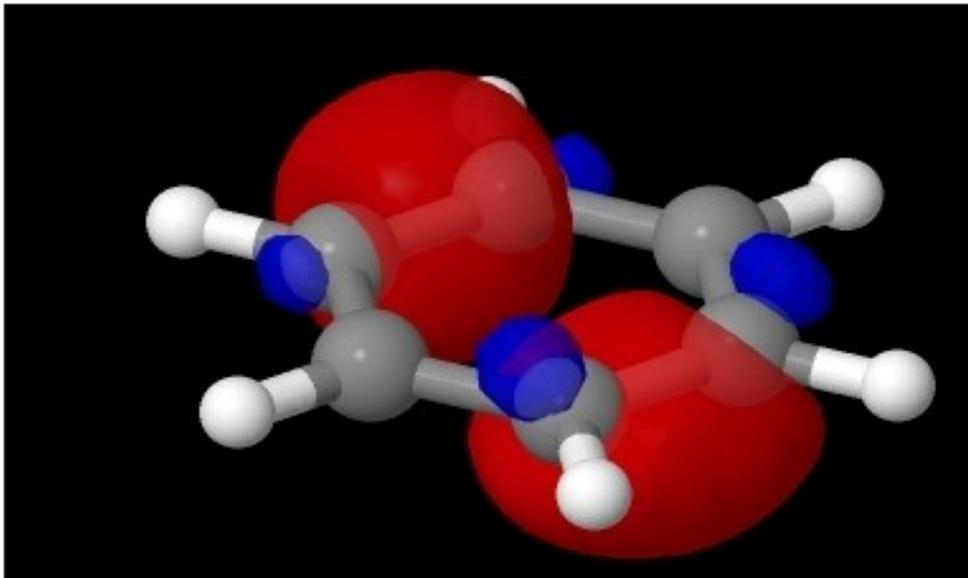
$\psi(x, y, z, t)$  Es la función de onda de la partícula de masa  $m$

cuya energía potencial es

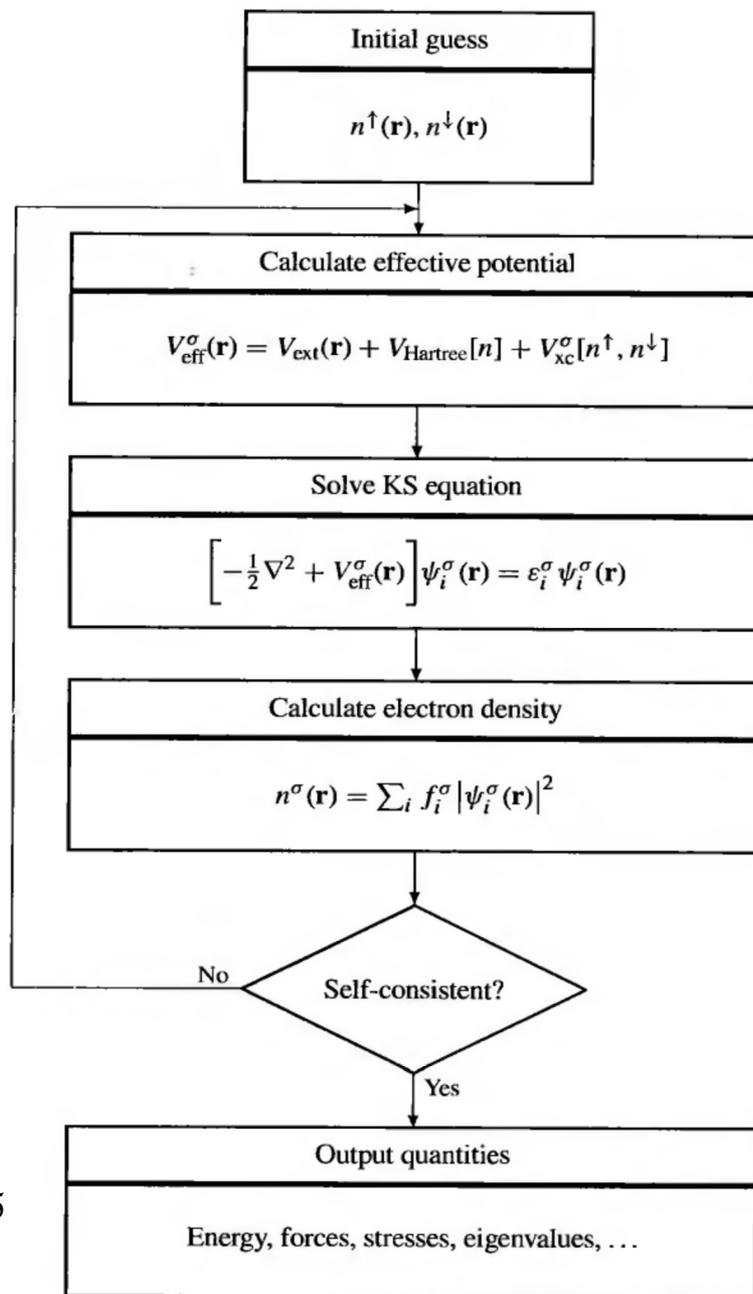
$$V(x, y, z)$$



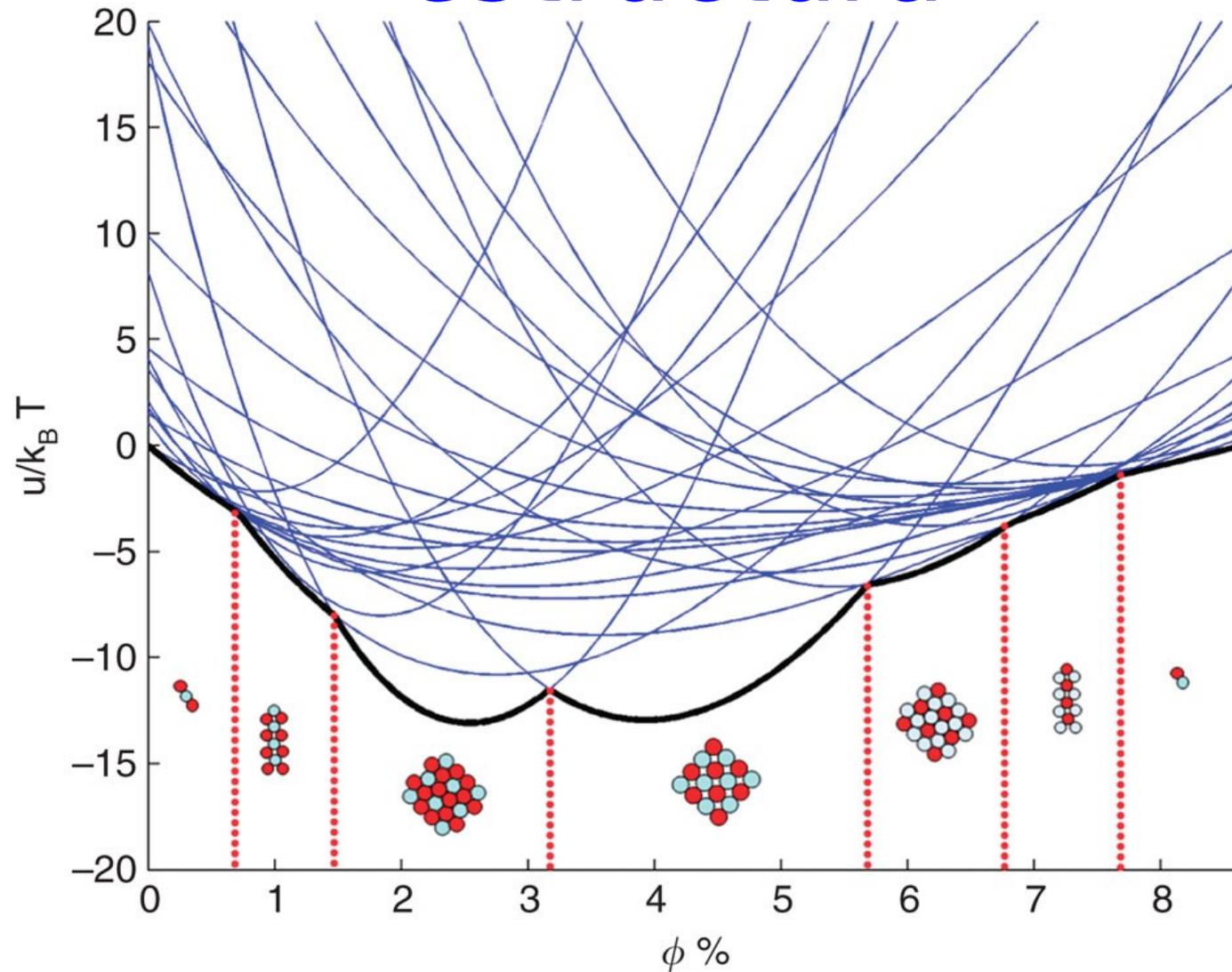
Two point defects on the copper (111) surface. The point defects (possibly impurity atoms) scatter the surface state electrons resulting in circular standing wave patterns. Source: M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler, IBM Almaden.



## Self-consistent Kohn–Sham equations

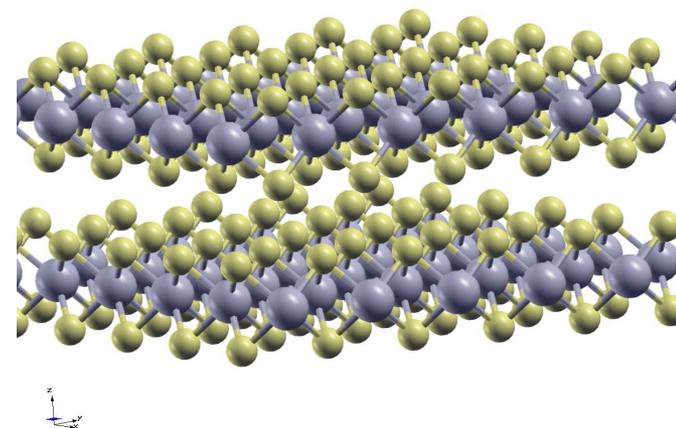
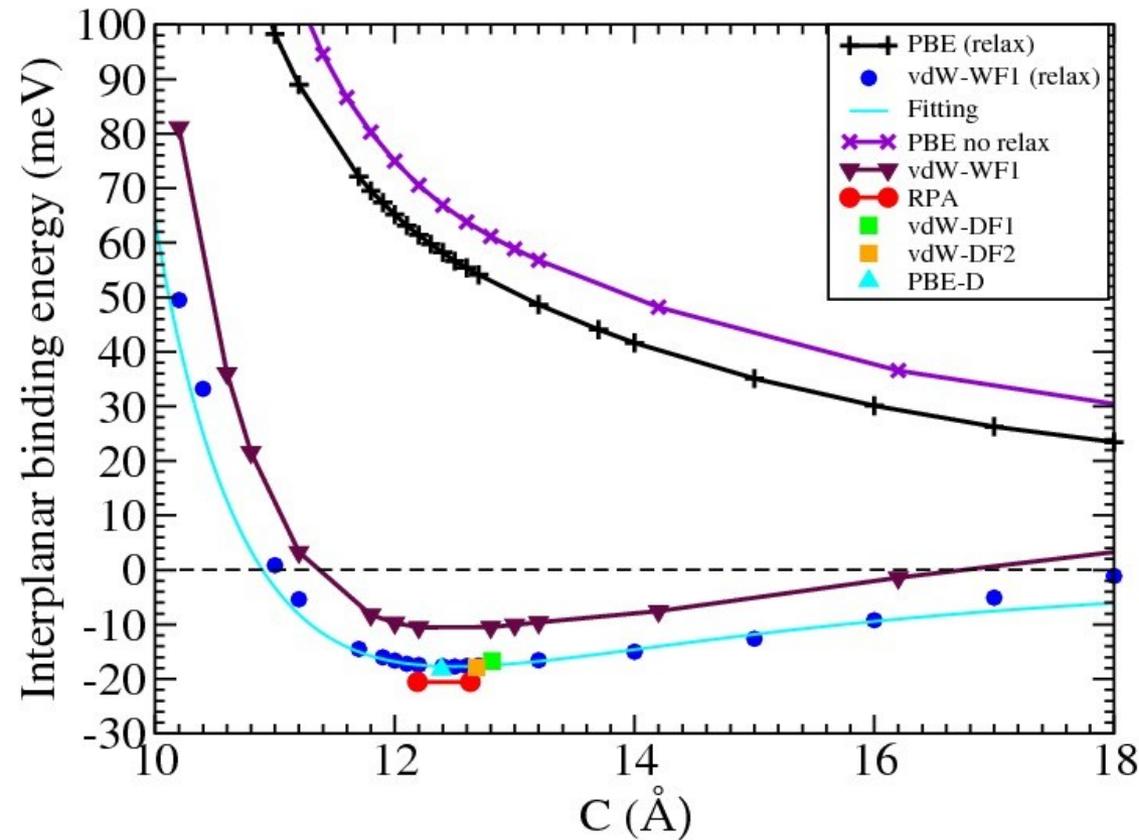


# Diagramas de energía y estructura



# Calculating equilibrium bulk structure of MoS<sub>2</sub> (need for vdW)

MoS<sub>2</sub>-2H\_1

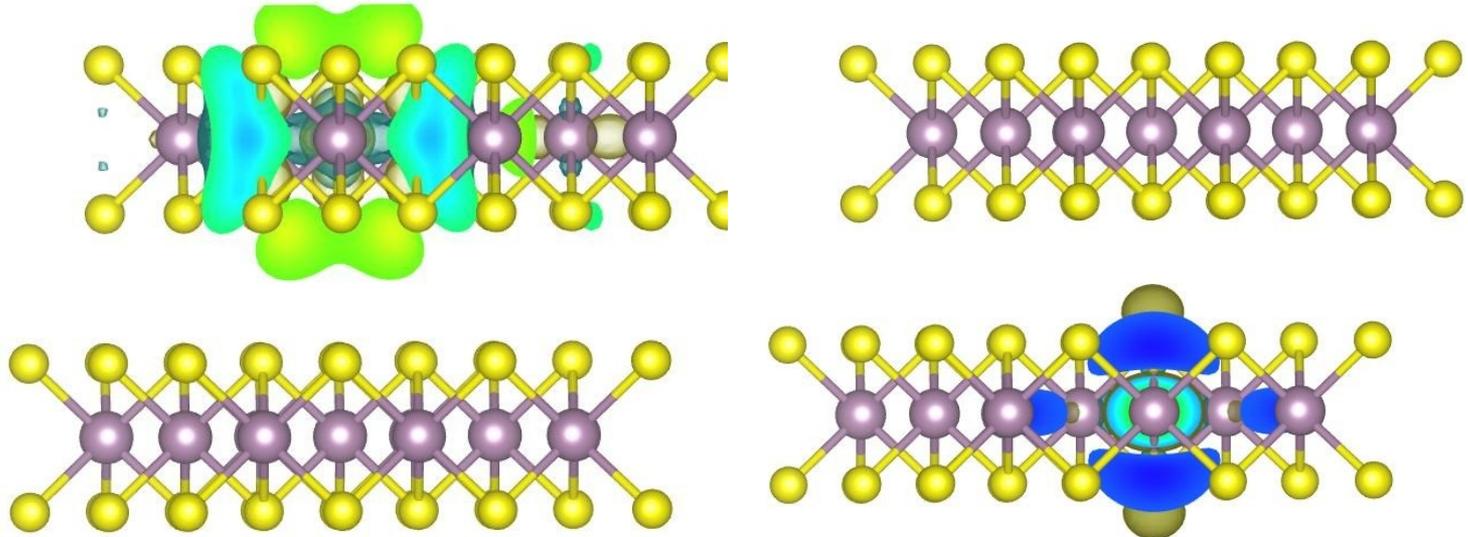


Phys. Rev. B. **87**: 245114 (2013)

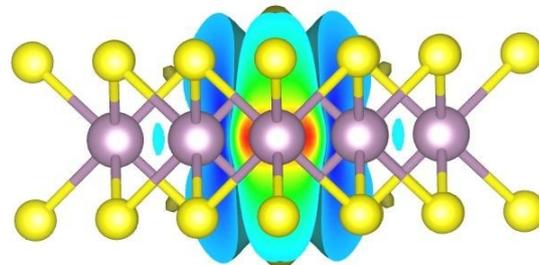
# Direct to indirect band gap transition revisited. (Sulphur vs Mo

MLWFs)

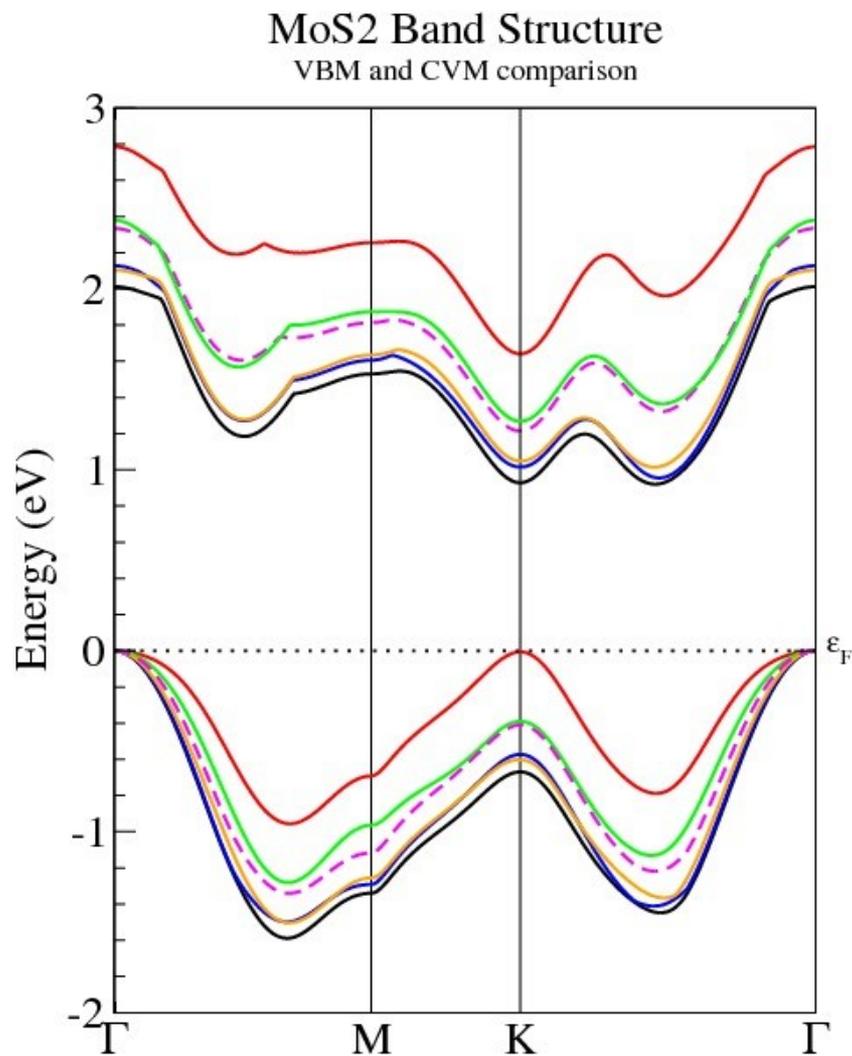
Bulk:



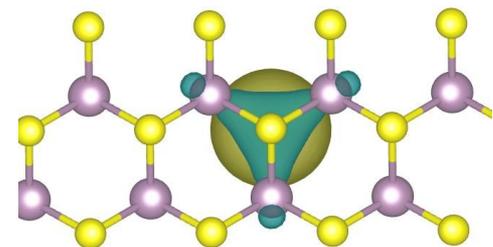
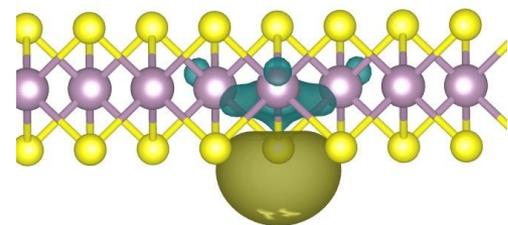
Monolayer:



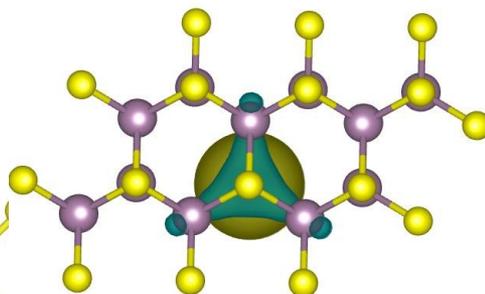
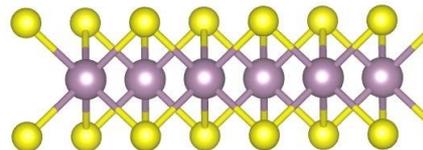
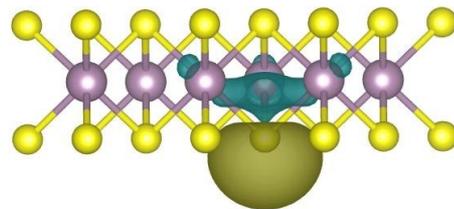
# Direct to indirect band gap transition revisited. (Su et al.)



Monolayer:

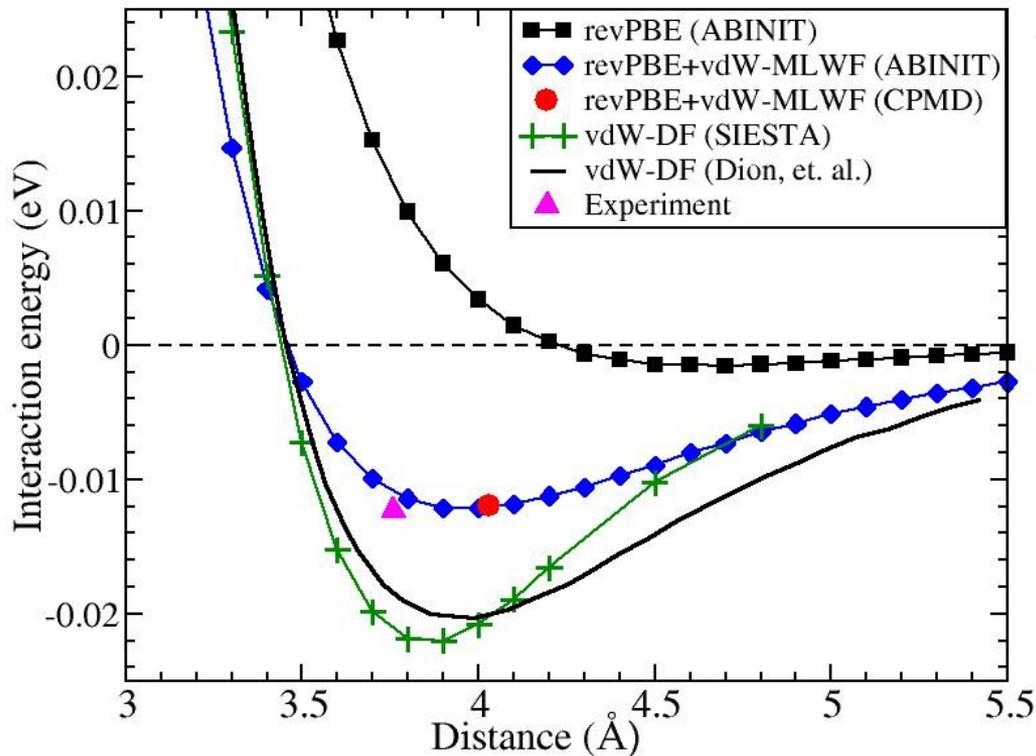


Bulk:



# Olvidando a los electrones

## ✉ Mecánica Newtoniana



$$\vec{F} = -\nabla U = -\left(\frac{\partial U}{\partial x}, \frac{\partial U}{\partial y}, \frac{\partial U}{\partial z}\right)$$

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

$$\vec{a}(\vec{r}) = \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$$

Trayectorias obtenidas por Integración numérica de las ecuaciones de Newton

# Modelamiento de Macromoléculas

Estructura a partir de experimentos  
(NMR, X-ray crystallography )  PDB

Protein Data Bank:

<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.d>

o

Estructura a partir de cálculos  
(simulaciones computacionales)

[Theoretical and Computational  
Biophysics Group](#). University of Illinois  
at Urbana-Champaign. NIH for  
macromolecular modeling and

# Conclusiones

- Dinámica de electrones y núcleos   
Estructura  Función  
Free software for molecular  
visualization:  
Avogadro, molekel, VMD, Xcrysden