

MOLECULAR MODELLING

ANALYSIS OF PROPERTIES OF A LENNARD-JONES LIQUID

Molecular Dynamics

Aina Gaya Àvila
Lecturer: Carles Calero

December 2, 2023

1 Introduction: Molecular Dynamics Simulations code

1.1 A system of N particles interacting through a Lennard-Jones potential in contact with a heat bath

El model microscòpic més senzill per simular una substància capaç d'existir tant en estat sòlid, líquid com gasós està basat en partícules esfèriques que interactuen entre elles. Aquesta interacció es modelitza tenint en compte dues característiques:

- La resistència a la compressió, és a dir, que cada partícula ocupa el seu espai i a curt abast la interacció és repulsiva. És el principi d'exclusió de Pauli.
- Les forces de Van der Waals entre àtoms als estats sòlid i líquid, que tendeixen a apropar les partícules.

El potencial més emprat per simular el descrit anteriorment és el de Lennard-Jones. Per descriure el potencial entre dues partícules i i j , localitzades a r_i i r_j , pren la forma següent:

$$u(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

On

- $r_{ij} = |r_i - r_j|$ és la distància entre partícules.
- σ defineix la mida de la partícula.
- ϵ és la profunditat del potencial. És una mesura de la magnitud de la interacció.

The main goal of this project is to do a computer simulation of a Lennard-Jones liquid in order to be able to study its properties.

A Lennard-Jones liquid is characterized by 2 parameters: ϵ and σ .

The system is initialized using a simple cubic structure. The density is fixed in $\rho = 0.7m\sigma^3$.

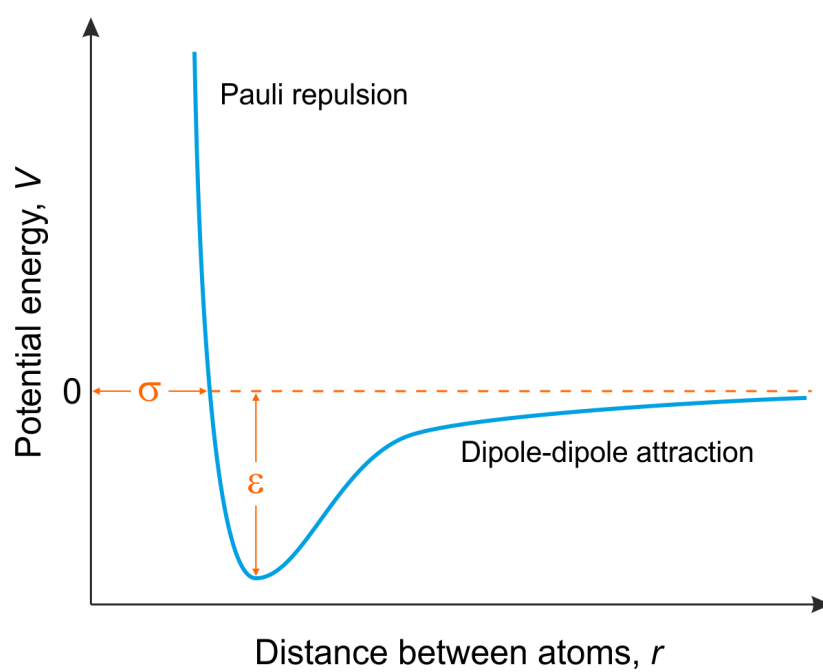


Figure 1: A Lennard-Jones potential.