

# Simulación con Dinámica Molecular para un sistema monodisperso de partículas que interaccionan con el potencial de Lennard-Jones

MARÍA INÉS VALENZUELA CARRILLO  
ANA GABRIELA CARRETAS TALAMANTE

*Departamento de Física, Universidad de Sonora*

## 1. OBJETIVO

Identificar las partes esenciales de un código de simulación de Dinámica Molecular NVT básico con el Algoritmo equivalente de Verlet (versión de velocidad, Swope, Andersen, Berens y Wilson, 1982), para un sistema de átomos iguales que interaccionan entre sí mediante un modelo de potencial central.

## 2. SISTEMA MODELO

El modelo de potencial de interacción par será el de Lennard-Jones:

$$u(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

donde  $\sigma$  es un parámetro de longitud que se puede identificar como diámetro efectivo y  $\epsilon$  corresponde al mínimo del potencial atractivo y que usualmente se identifica como energía de enlace. La forma de este potencial se muestra en la siguiente figura

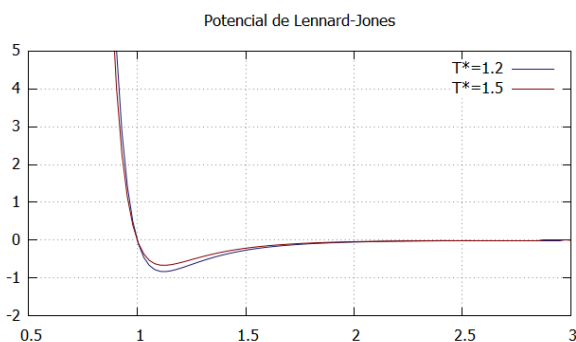


FIGURA 1: Potencial de LJ para los parámetros utilizados en la simulación.

Se han graficado las formas del potencial para las dos temperaturas reducidas con que se simuló el sistema. En la siguiente sección se explicará con más detalle el cómo se redujo el potencial.

## 3. REDUCCIÓN DE VARIABLES

Es posible definir la posición, energía y temperatura reducidas de la siguiente manera, tomando como longitud característica el diámetro  $\sigma$  de las partículas y como energía característica la energía térmica  $\beta$

$$r^* \equiv \frac{r}{\sigma} \quad (2)$$

$$E^* \equiv \frac{E}{\epsilon} \quad (3)$$

$$T^* \equiv \frac{k_B T}{\epsilon} \quad (4)$$

$$P^* \equiv \frac{\sigma^3}{\epsilon} P \quad (5)$$

$$F^* \equiv \frac{\sigma F}{\epsilon} \quad (6)$$

$$v^* \equiv \sqrt{\frac{m}{\epsilon}} v \quad (7)$$

$$n^* \equiv n \sigma^3 \quad (8)$$

## 4. CÓDIGO COMENTADO

**Link para mostrar el código:** DM.f90

Se comentó el código proporcionado de tal forma que pudiera seguirse por una persona que desconoce el funcionamiento de la simulación con dinámica molecular, pero está familiarizada con la jerga de las simulaciones (que ya haya trabajado con Dinámica Browniana/-MonteCarlo).

Los desarrollos que fueron necesarios para comprender el código solo fueron dos, reducir las variables y la forma del potencial y calcular la derivada del potencial para el cálculo de las fuerzas y presión. Las variables se redujeron en la sección anterior; el potencial reducido tomó la forma

$$u^*(r^*) = \frac{4}{T^*} \left[ \left( \frac{1}{r^*} \right)^{12} - \left( \frac{1}{r^*} \right)^6 \right] \quad (9)$$

y el parámetro para calcular la fuerza para este potencial

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{r^*} \frac{du^*}{dr^*} &= -\frac{1}{r^*} \frac{d}{dr^*} \left( \frac{4}{T^*} \left[ \left( \frac{1}{r^*} \right)^{12} - \left( \frac{1}{r^*} \right)^6 \right] \right) \\
 &= -\frac{1}{r^*} \left( \frac{4}{T^*} \left[ -12 \left( \frac{1}{r^*} \right)^{13} + 6 \left( \frac{1}{r^*} \right)^7 \right] \right) \\
 -\frac{1}{r^*} \frac{du^*}{dr^*} &= \frac{24}{T^*} \left[ 2 \left( \frac{1}{r^*} \right)^{14} - \left( \frac{1}{r^*} \right)^8 \right] \quad (10)
 \end{aligned}$$

Esta última ecuación se escribe de manera apropiada en el código, para poder utilizar sus partes tanto para el cálculo de las fuerzas como para la presión del sistema.

## 5. RESULTADOS

Se realizaron simulaciones con dinámica molecular para dos temperaturas reducidas,  $T^* = 1.5$  para la temperatura supercrítica y  $T^* = 1.2$  para la temperatura subcrítica, según el diagrama de fases del potencial reportado por Frenkel [2].

Las condiciones del sistema fueron las siguientes:

*!PARAMETROS PARA DM-LJ*

*!N: numero de particulas*

*!NN2: numero de columnas de la*

*! matriz de configuracion (ensemble)*

*!NENER: Configuracion donde alcanza el*

*! equilibrio*

**PARAMETER** (N=250)

**PARAMETER** (NN2=5000)

**PARAMETER** (NENER=50000)

*!NSTEP: numero total de configuraciones*

*!IPRINT: frecuencia para imprimir en*

*! pantalla*

*!NFREC: frecuencia para guardar las*

*! configuraciones*

*!DT: tiempo de paso*

NSTEP=150000

IPRINT=10000

NFREC=20

DT=0.0001

*!DENS: concentracion reducida del*  
*! sistema*

*!TEMP: temperatura reducida*

DENS=0.6

TEMP=1.2, 1.5

*!XM: masa*

*!SIGMA: diametro de la particula*

XM=1.0

SIGMA=1.0

Las funciones de distribución radial obtenidas:

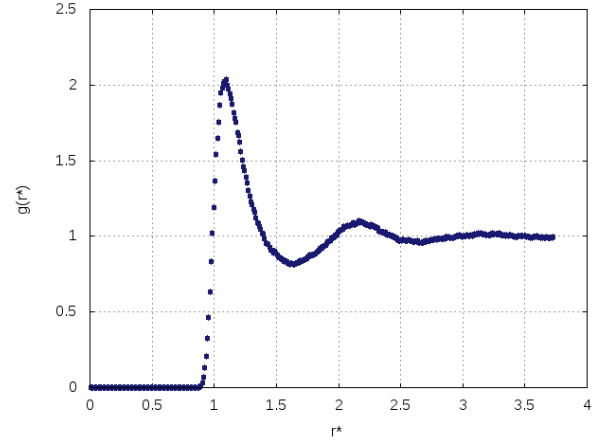


FIGURA 2: Función de distribución radial para la temperatura reducida  $T^* = 1.5$

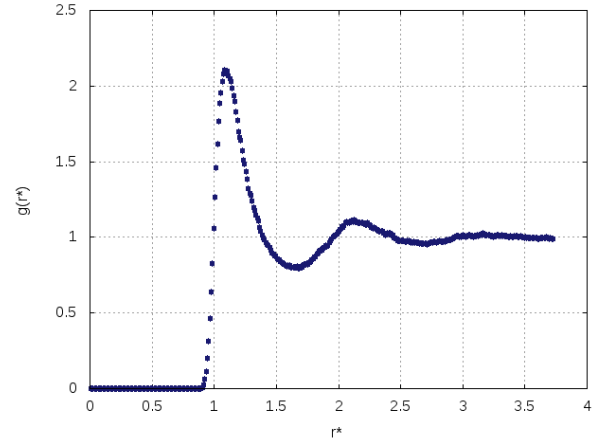


FIGURA 3: Función de distribución radial para la temperatura reducida  $T^* = 1.2$

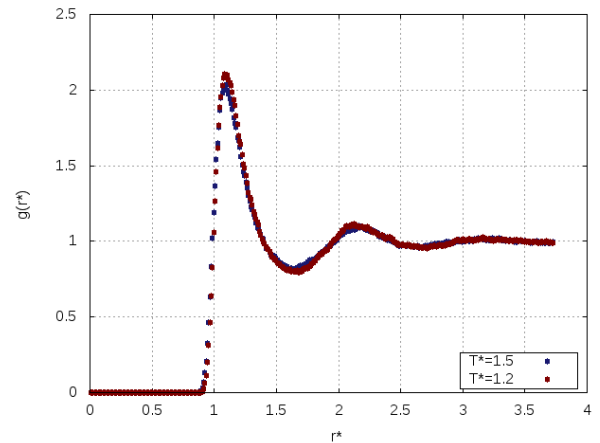


FIGURA 4: Comparación de las funciones de distribución radial entre ambas temperaturas reducidas

Salvo la ligera diferencia en los máximos, la estructura es básicamente la misma con ambas temperaturas reducidas.

Se muestran diferentes escalas de tiempo para el desplazamiento cuadrático medio; comenzando con la temperatura supercrítica:

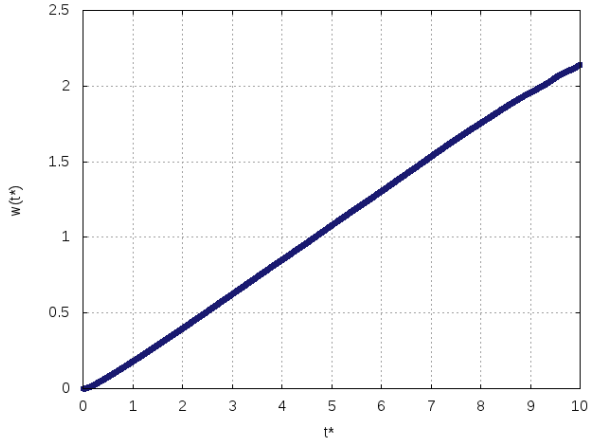


FIGURA 5: Desplazamiento cuadrático medio a tiempos largos para  $T^* = 1.5$

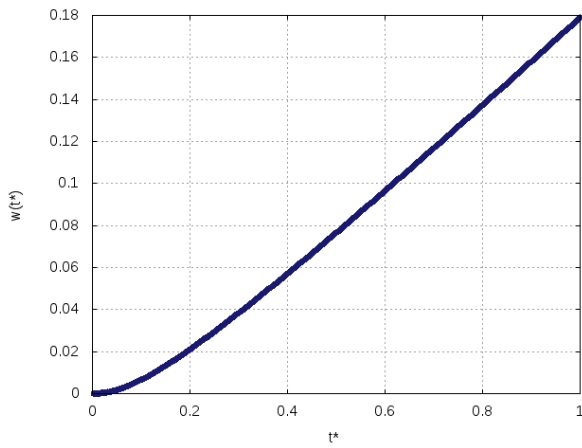


FIGURA 6: Desplazamiento cuadrático medio a tiempos medios para  $T^* = 1.5$

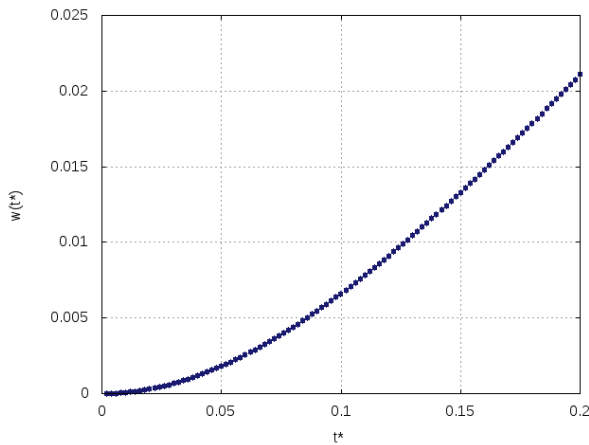


FIGURA 7: Desplazamiento cuadrático medio a tiempos cortos para  $T^* = 1.5$

Para la temperatura subcrítica ahora:

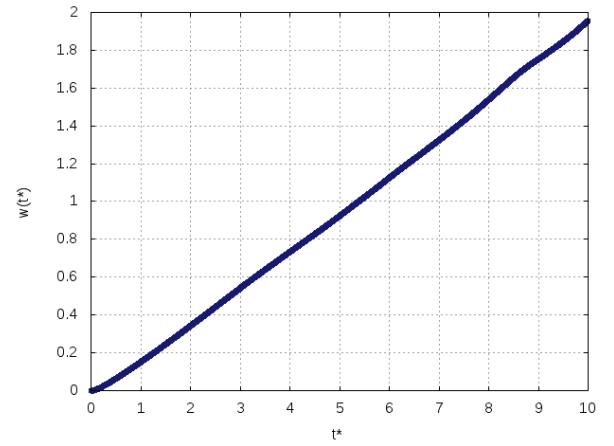


FIGURA 8: Desplazamiento cuadrático medio a tiempos largos para  $T^* = 1.2$

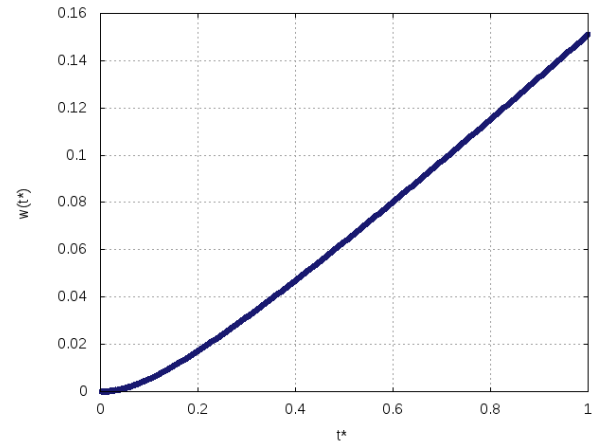


FIGURA 9: Desplazamiento cuadrático medio a tiempos medios para  $T^* = 1.2$

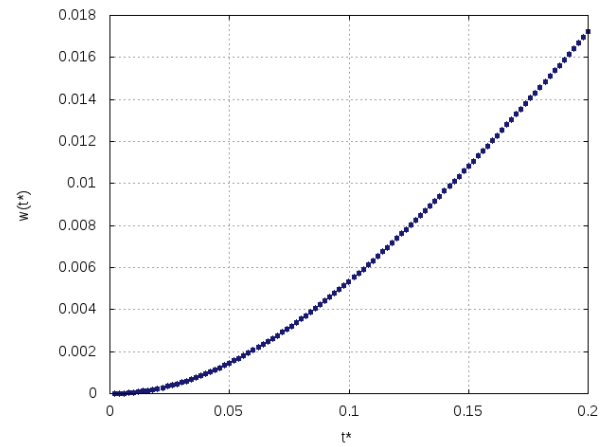


FIGURA 10: Desplazamiento cuadrático medio a tiempos cortos para  $T^* = 1.2$

El desplazamiento cuadrático medio es similar para ambas temperaturas y se observa claramente como para tiempos cortos se sigue una forma cuadrática.

## 6. COLOFÓN

Las observaciones más relevantes a la ejecución de la Dinámica Molecular son las siguientes:

- Respecto al desplazamiento cuadrático medio para ambas temperaturas se cumple el resultado esperado, para tiempos cortos se comporta cuadráticamente y corresponde al régimen balístico, cuando la molécula va como partícula libre. Después de este régimen se encuentra el correspondiente a la interacción con las demás partículas.
- Podemos comparar el desplazamiento cuadrático medio con el de Dinámica Browniana, en el cual el régimen balístico se realiza durante un tiempo tan corto que no es posible distinguirlo en la gráfica.
- Otro punto de comparación de la Dinámica Molecular con la Dinámica Browniana y Monte Carlo es el tiempo de ejecución, en Dinámica Molecular los programas corrieron mucho más rápido que en las otras simulaciones.
- La diferencia entre la isoterma supercrítica y la subcrítica no es muy notoria por lo que sería interesante ejecutar el programa para una isoterma subcrítica más profunda y observar si ocurren cambios notorios.

## REFERENCIAS

- [1] YEOMANS, LAURA, *Proyecto sobre Simulación de Dinámica Browniana*. Recuperado de <http://paginas.fisica.uson.mx/laura.yeomans/dex2181/ProyectoDB-final.pdf>
- [2] D. FRENKEL, B. SMIT, *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*.