



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FCFM



FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

Simuladores Moleculares

Dinámica molecular con el potencial  
de Lennard-Jones en dos y tres dimensiones  
para diferentes densidades

Omar Gonzalez Amezcua

Nombre:  
Giovanni Gamaliel López Padilla

Matricula:  
1837522

30 de septiembre de 2020

Se propuso un sistema conformado por átomos de carbono en dos y tres dimensiones en los cuales se vario sus densidades en diferentes valores , los sistemas se dejaron interaccionar en una simulación bajo el efecto del potencial de Lennard-Jones realizando  $2 \times 10^6$  pasos. Durante la simulación se monitoreo la energía cinética, energía potencial y energía total, a la par se calculó su función de distribución radial de los sistemas.

**Palabras clave:** Potencial de Lennard-Jones, distribución radial, dos dimensiones

## I. INTRODUCCIÓN

## II. OBJETIVO GENERAL

## III. OBJETIVO ESPECÍFICO

## IV. MARCO TEÓRICO

El potencial de Lennard-Jones describe la energía potencial de interacción entre dos átomos o moléculas netros sujetos a dos fuerzas distintas, una fuerza que tiene mayor acción cuando la distancia entre las dos sistemas es grande y la otra fuerza de interacción tiene una mayor acción a corta distancia. Este potencial tiene la siguiente forma:

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

donde:

- $V$  es el potencial intermolecular entre dos átomos o partículas.
- $\epsilon$  es la profundidad del valle que define que tan fuerte es la atracción entre partículas.
- $\sigma$  es la distancia a la cual el potencial entre dos partículas es igual a cero.
- $r$  es la distancia de separación entre dos partículas

Los parámetros  $\epsilon$  y  $\sigma$  son ajustados para reproducir datos experimentales o pueden ser deduidos de resultados a partir de cálculos de química cuántica. La figura 1 es el potencial de Lennard-Jones con  $\epsilon = 1$  y  $\sigma = 1$ .

En donde expone una gráfica de potenciales universales para estructuras de grafito, y la que tenemos se asemeja en comportamiento a pesar de no tener la estructura de un grafito. Teniendo el potencial de la ecuación 1, podemos deducir la fuerza, ya que esta puede ser deducida a partir de aplicar el gradiente a la función  $V(r)$ , teniendo así la siguiente expresión:

$$\vec{F}(r) = 48\epsilon \left( \frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - \frac{1}{2} \frac{\sigma^6}{r^7} \right) \hat{r} \quad (2)$$

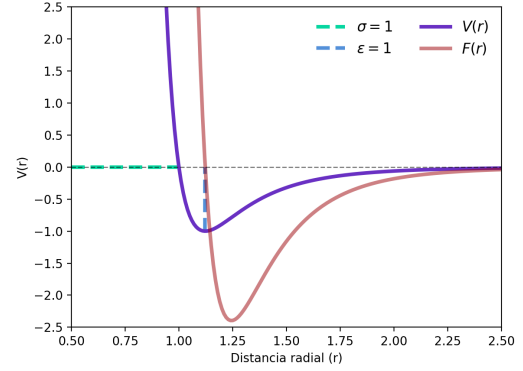


Figura 1: Potencial y fuerza de Lennard-Jones

reescribiendo las ecuaciones 1 y 2 para tener la suma de estas en un sistema de  $n$  partículas se tiene lo siguiente:

$$U_t = \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j<i}^N V_i, j(|r_j - r_i|) \right\rangle_t \quad (3)$$

$$F_i = \frac{48}{\sigma^2} \sum_{j \neq i} \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] (r_j - r_i) \quad (4)$$

Teniendo ya la dinámica se este sistema podemos ir monitoreando la energía cinética de la siguiente manera:

$$T_t = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m |v_i(t)|^2 \right\rangle \quad (5)$$

por lo tanto, la energía total para un tiempo  $t$  será:

$$E_t = T_t + U_t \quad (6)$$

## V. RESULTADOS

## VI. CÓDIGO

Dimensión	Número de átomos	$\epsilon$	$\sigma$	$\rho$	Número de pasos
2	784	1	1	Variable*	$2 \times 10^6$
3	864				

Tabla I: Parámetros para la simulación para las diferentes dimensiones.

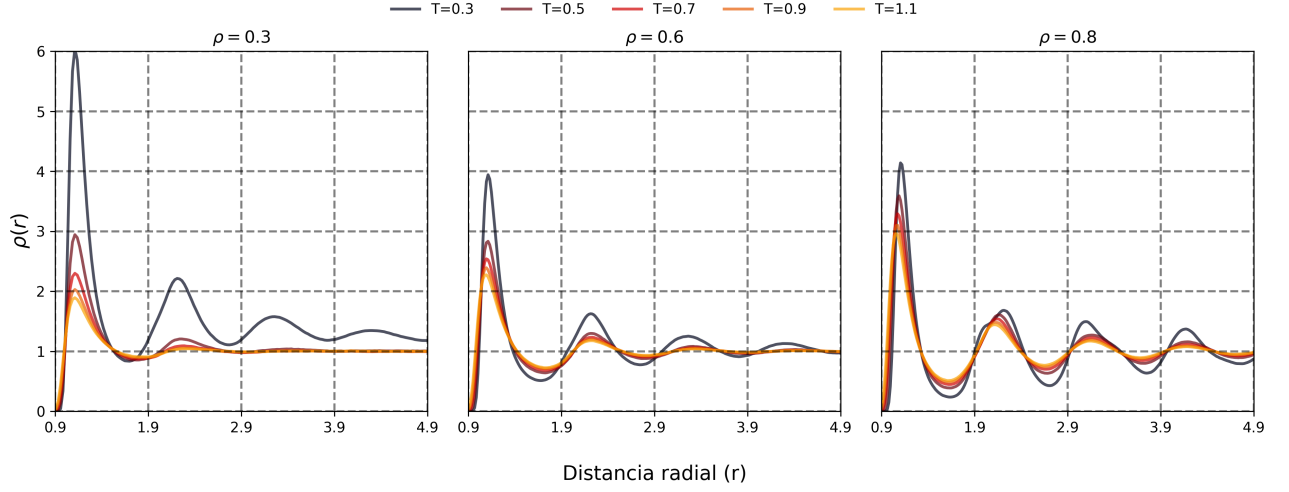


Figura 2: Distribución radial de la estructura

- 
- [1] V. V. Begun, M. I. Gorenstein, and O. S. Zozulya. Fluctuations in the canonical ensemble. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 72(1):1–13, 2005.
  - [2] J. M. Borjas-Mayorga, M. E. Grimaldo-Reyna, F. J. Almaguer-Martínez, O. González-Amezcu, and J. R. Cantú-González. Monte Carlo simulation for a gas of hard spheres in d-dimensional space: Equilibrium structure and state equations. *Revista Mexicana de Física E*, 65(2):206–212, 2019.
  - [3] S H Chastain. A simulation experiment with a canonical ensemble. (April 2013):8–11, 2016.
  - [4] Carlos E. Fiore, Vera B. Henriques, and Mario J. De Oliveira. Canonical and microcanonical Monte Carlo simulations of lattice-gas mixtures. *Journal of Chemical Physics*, 125(16):1–9, 2006.
  - [5] Hiqmet Kamberaj. Molecular Dynamics Methods in Simulations of Macromolecules. pages 189–280, 2020.
  - [6] Pascal Viot. Numerical Simulation in Statistical Physics Lecture in Master 2 “ Physics of complex systems ” and “ Modeling , Statistics and Algorithms for out-of-equilibrium systems . 2015.

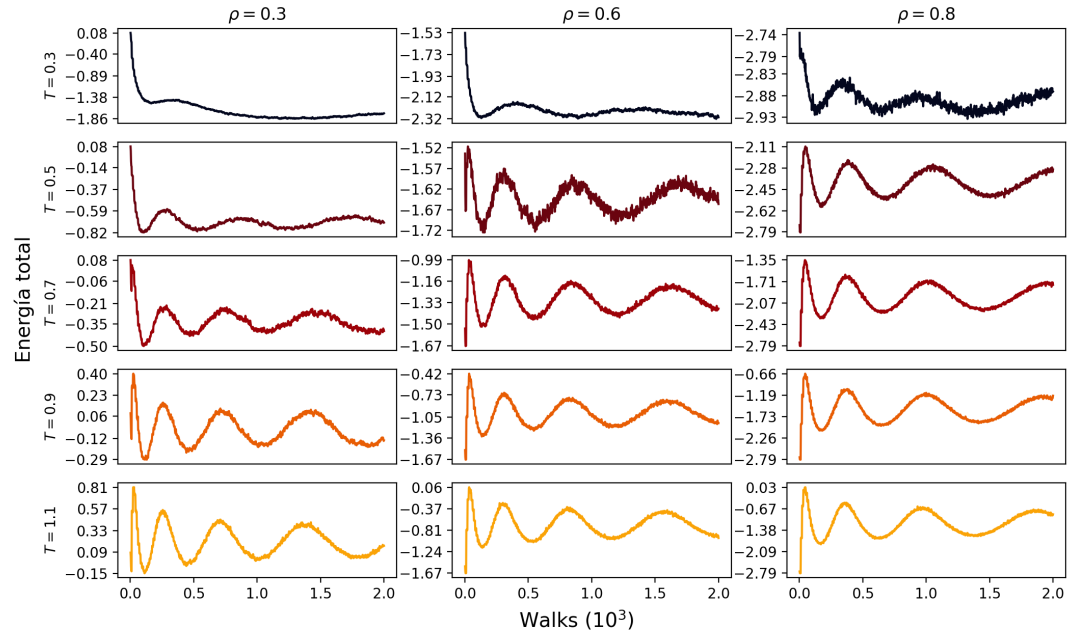


Figura 3: Energía total a lo largo de la simulación de las densidades seleccionadas variando la temperatura del exterior.