



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

20 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 2×10^6 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

La dinámica molecular es un técnica de simulación en la que se permite que átomos y moléculas interactúen por un período, permitiendo una visualización del movimiento de las partículas, en donde le tendremos que especificar el tipo de átomo que es, sus posiciones iniciales, velocidades iniciales, el potencial de interacción y los parámetros que este puede llegar a necesitar para realizar su calculo.

II. OBJETIVO GENERAL

Simular la configuración cuadrada y FCC de átomos de Carbono con el potencial de Lennard-Jones.

III. OBJETIVO ESPECÍFICO

1. Encontrar la distribución radial del sistema para diferentes densidades.
2. Contrastar las diferencias en las funciones radiales entre los sistemas de dos y tres dimensiones.
3. Monitorizar la energía en la dinámica del sistema.

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.

- ϵ es la profundidad del valle que define que tan fuerte es la atracción entre partículas.
- σ 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 ϵ y σ son ajustados para reproducir datos experimentales o pueden ser deducidos 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 [1] expone una gráfica de potenciales universales para estructuras de gráfito, 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:

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

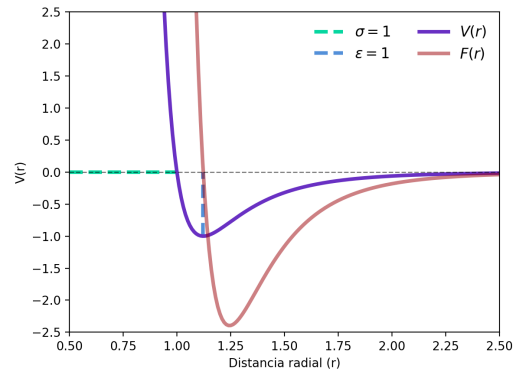


Figura 1: Potencial y fuerza de Lennard-Jones

reescribiendo las ecuaciones 1 y 2 para tener la suma de estas en un sistema de n partículas ([2] y [3]) se tiene lo siguiente:

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

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

| Dimensión | Número de átomos | ϵ | σ | ρ | Número de pasos |
|-----------|------------------|------------|----------|-----------|-----------------|
| 2 | 784 | 1 | 1 | Variable* | 2×10^6 |
| 3 | 864 | | | | |

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

Teniendo ya la dinámica de 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

Planteando un sistema cuadrangular, en el cual todos los átomos se encuentran alineados como en la figura 2.

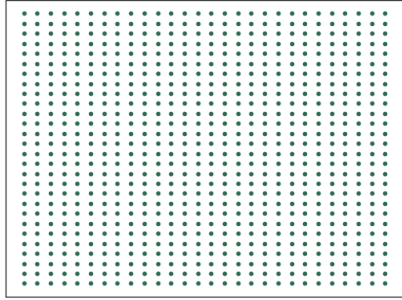


Figura 2: Posición inicial del sistema en dos dimensiones.

realizando una simulación de la dinámica con los parámetros establecidos en el tabla I se calcula la distribución radial para el caso de segunda dimensión de la siguiente manera:

$$\rho(r) = \frac{1}{N} \frac{\left\langle \sum_{i=1}^N n_i(r, \Delta r) \right\rangle}{\pi r \rho \Delta r} \quad (7)$$

donde:

$$\pi r \Delta r = \pi \left(\left[r + \frac{\Delta r}{2} \right]^2 - \left[r - \frac{\Delta r}{2} \right]^2 \right) \quad (8)$$

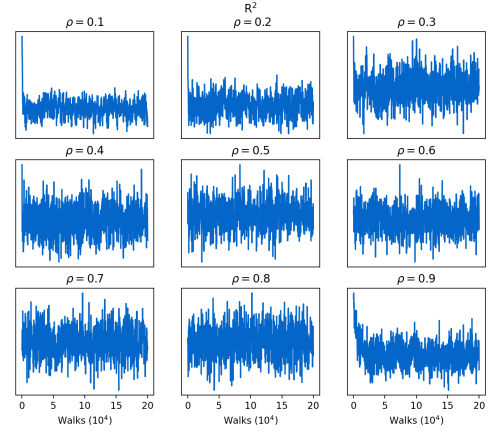
para el caso de tres dimensiones se utilizó la siguiente:

$$\rho(r) = \frac{1}{N} \frac{\left\langle \sum_{i=1}^N n_i(r, \Delta r) \right\rangle}{4\pi r^2 \rho \Delta r} \quad (9)$$

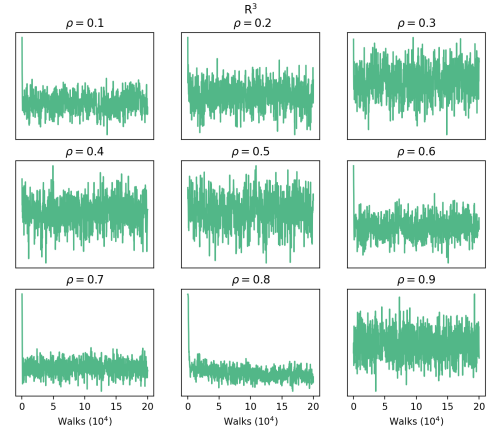
donde:

$$4\pi r^2 \Delta r = \frac{4}{3} \pi \left(\left[r + \frac{\Delta r}{2} \right]^3 - \left[r - \frac{\Delta r}{2} \right]^3 \right) \quad (10)$$

La misma simulación lleva a cabo el cálculo de la energía potencial y la energía cinética conforme las ecuaciones 3 y 5, por lo que el cálculo de la energía total se realiza de manera simple como se describe en la ecuación 6, en la figura 4 se muestra la energía total del sistema a lo largo de la simulación para dos dimensiones (azul) y tres dimensiones (verde).



(a) Energía total para las diferentes densidades en un sistema de dos dimensiones.



(b) Energía total para las diferentes densidades en un sistema de tres dimensiones.

Figura 4: Energía total de los sistemas en dos y tres dimensiones a lo largo de la simulación

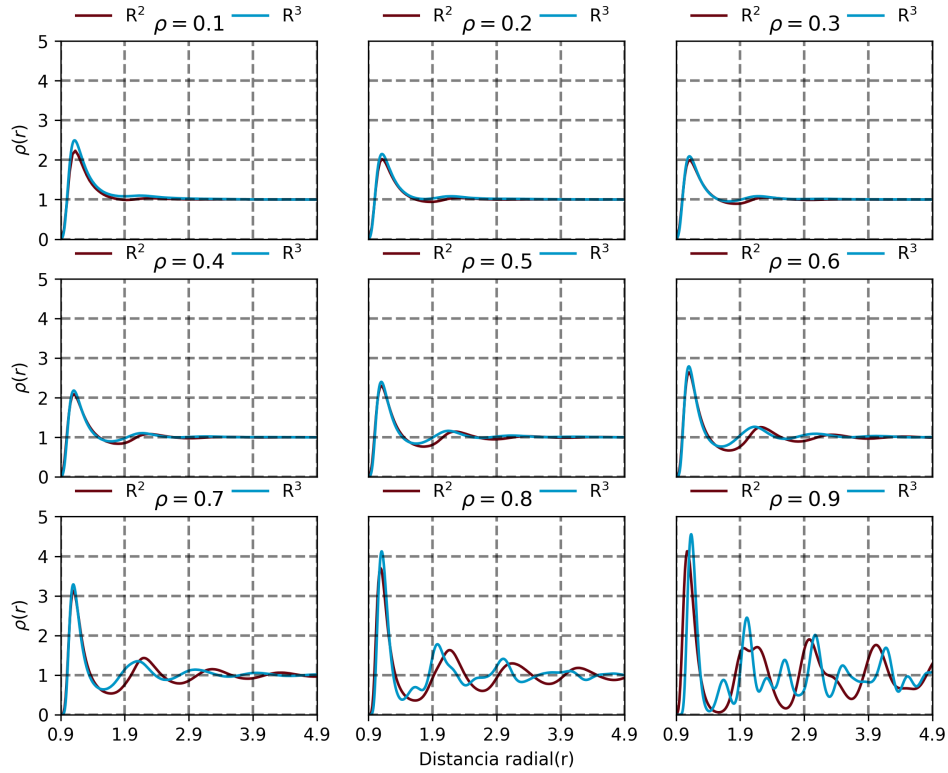


Figura 3: Distribución radial de la estructura

Con las ecuaciones 7 y 9 se calcularon las distribuciones radiales para dos y tres dimensiones mostradas en la figura 3

VI. CONCLUSIONES

- Observando el comportamiento de la energía total en se observa que en el sistema de dos y tres dimensiones, mientras mayor es la densidad el comportamiento en seguida llega a un estado oscilatorio más rápido.
- Comparando el comportamiento de la energía total para una misma densidad en dos y tres dimensiones, esta llega a comportarse de una manera semejante a pesar de sus diferencias espaciales.
- Observando la distribución radial, mientras más va creciendo la densidad, existe una mayor concentración de átomos a diferentes distancias.
- Comparando el comportamiento en las

distribuciones radiales para una misma densidad se observa que para el caso de tres dimensiones esta llega a obtener una mayor variación mientras mas se aumenta la distancia radial a comparación del caso de dos dimensiones.

VII. CÓDIGO

- Github - MD-n3.f
Este código contiene la simulación del sistema.
- Github - Gráfica del potencial de Lennard-Jones
Este código realiza la figura 1
- Github - Gráfica de la posición inicial y Distribución radial
Este código genera la figura 2 y 3 a
- Github - Gráfica de las energías
Este código genera la gráfica 4

-
- [1] L. A. Girifalco, M. Hodak, and R. S. Lee, Carbon nanotubes, buckyballs, ropes, and a universal graphitic potential, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **62**, 13104 (2000).
- [2] H. C. Andersen, Molecular Dynamics Simulations at Constant Temperature and Pressure, *Computer Simulation in Materials Science* **2384**, 72 (1980).
- [3] B. J. Lee and J. W. Lee, A modified embedded atom method interatomic potential for carbon, *Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **29**, 7 (2005).
- [4] K. Koura and H. Matsumoto, Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lennard-Jones potential, *Physics of Fluids A* **3**, 2459 (1991).
- [5] C. L. Kong, Combining rules for intermolecular potential parameters. II. Rules for the Lennard-Jones (12-6) potential and the Morse potential, *Journal of Chemical Physics* **59**, 2464 (1973).