



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 dimensiones
Omar Gonzalez Amezcua**

Nombre:
Giovanni Gamaliel López Padilla

Matricula:
1837522

18 de septiembre de 2020

Resumen

Se propuso un sistema conformado por átomos de carbono en una configuración cuadrangular donde cada átomo se encuentra a una distancia interatómica de $r = 1.8257$, el sistema se dejara 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 del sistema obteniendo un máximo a $r = 1.11187677$

Palabras clave

Potencial de Lennard-Jones, distribución radial, dos dimensiones

Introducción

Objetivo general

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

Objetivo específico

1. Encontrar la distribución radial del sistema.
2. Monitorizar la energía en la dinámica del sistema.

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 $\sigma = 1$.

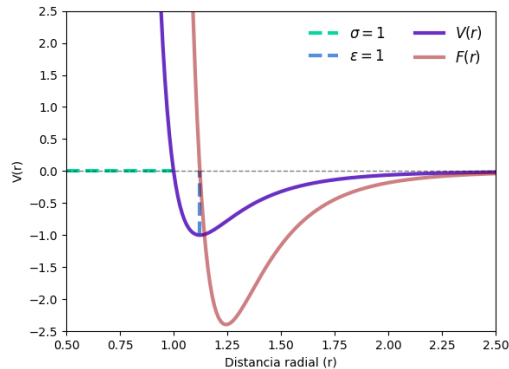


Figura 1: Potencial y fuerza de Lennard-Jones

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:

$$\vec{F}(r) = 4\epsilon \left(12 \frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - 6 \frac{\sigma^6}{r^7} \right) \hat{r} \quad (2)$$

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

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

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

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:

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

Resultados

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

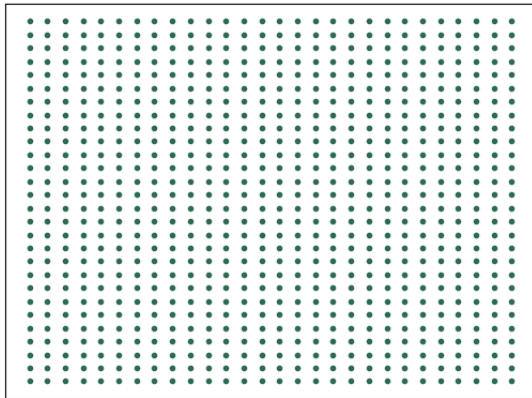


Figura 2: Posición inicial de la dinámica

realizando una simulación de la dinámica entre estos átomos realizando 2000000 caminatas con 784 átomos se calcula la

distribución radial de la siguiente manera:

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

donde:

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

y la función $n_i(r, \Delta r)$ lleva el conteo del número de átomos que se encuentran en un anillo de radio r y espesor Δr , llegando así a calcular la función de distribución radial mostrada en la figura 3

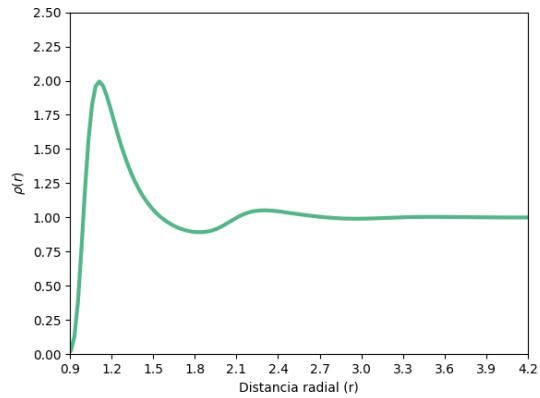


Figura 3: Distribución radial de la estructura

en la figura 4 se observa como es la evolución del sistema conforme se van realizando más pasos en la dinámica. La misma simulación lleva a cabo el cálculo de la energía potencial y la energía cinética conforme las ecuaciones 5 y 3, por lo que el cálculo de la energía total se realiza de manera simple, con esto en la figura 5 se muestra la energía cinética, potencial y total del sistema a lo largo de la simulación.



Figura 4: Dinámica molecular en diferentes tiempos

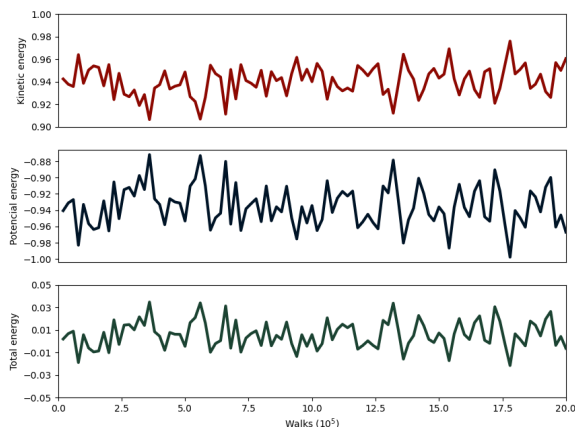


Figura 5: Energía cinética, potencial y total del sistema en toda la simulación

Conclusiones

Código

- Github - MD-n3.f
Este código contiene la simulación del sistema.
- Github - Gráfica de las energías
Este código genera la gráfica 5
- Github - Gráfica de la posición inicial y Distribución radial
Este código genera la figura 2 y 3
- Github - Animación de la dinámica
Este código genera la animación mostrada en la figura 4
- Github - Gráfica para diferentes tiempos
Este código genera la figura 4
- Github - Gráfica del potencial de Lennard-Jones
Este código realiza la figura 1

Referencias

- [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(19):13104–13110, 2000.
- [2] Chang Lyoul 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(5):2464–2467, 1973.
- [3] Katsuhisa Koura and Hiroaki Matsumoto. Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lennard-Jones potential. *Physics of Fluids A*, 3(10):2459–2465, 1991.
- [4] Byeong Joo Lee and Jin Wook Lee. A modified embedded atom method interatomic potential for carbon. *Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*, 29(1):7–16, 2005.
- [5] Shuichi Nosé. Molecular Dynamics Simulations at Constant Temperature and Pressure. *Computer Simulation in Materials Science*, 2384(1980):21–41, 1991.