



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

17 de septiembre de 2020

Resumen

Palabras clave

Introducción

Objetivo general

Objetivo específico

Marco teórico

Resultados

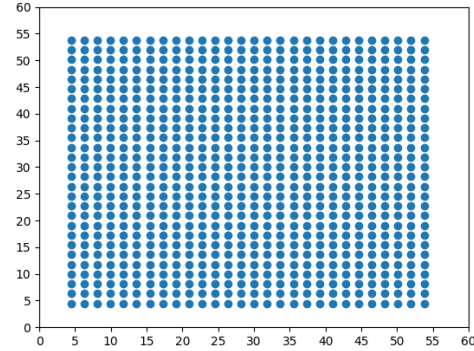


Figura 2: Posición inicial de la dinámica

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

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

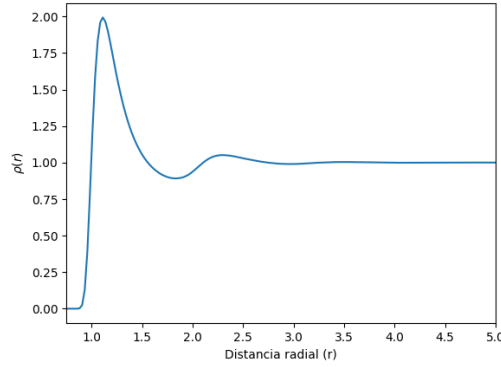


Figura 3: Distribución radial de la estructura

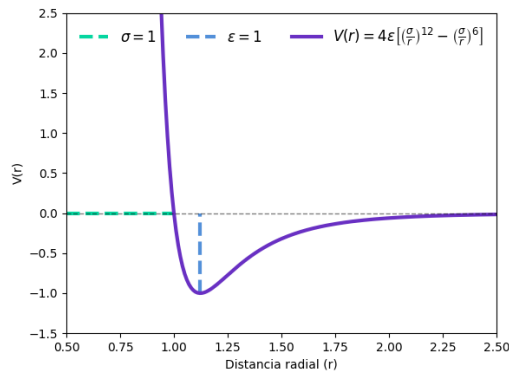


Figura 1: Potencial Lennard-Jones

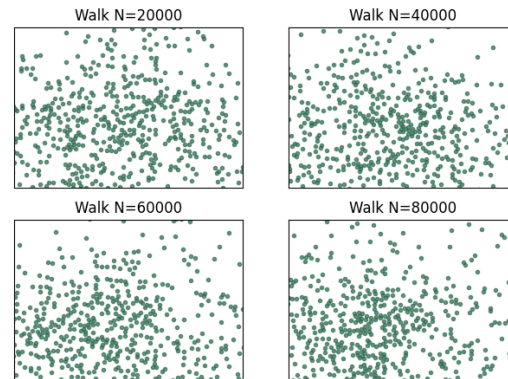


Figura 4: Dinámica molecular en diferentes tiempos

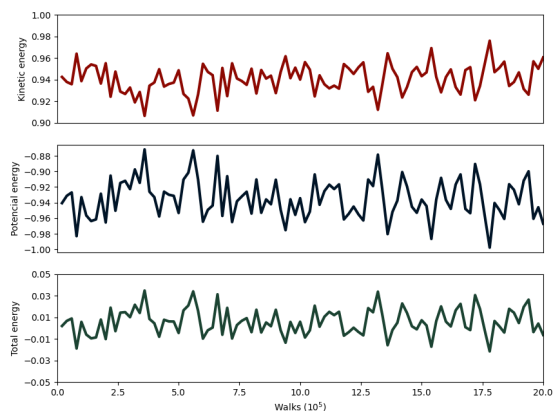


Figura 5: Energía cinética, potencial y total del sistema en toda la simulación

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.