



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

20 de septiembre de 2020

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  $2 \times 10^6$  pasos. Durante la simulación se monitoreo la energía cinética, energía potencial y energía total, a la par se calculó su función de distribución radial del sistema obteniendo un máximo a  $r = 1,11187677$ .

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

## I. INTRODUCCIÓN

La dinámica molecular es una 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 cálculo.

## II. OBJETIVO GENERAL

Simular la configuración cuadrada 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.

- $\epsilon$  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 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:

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

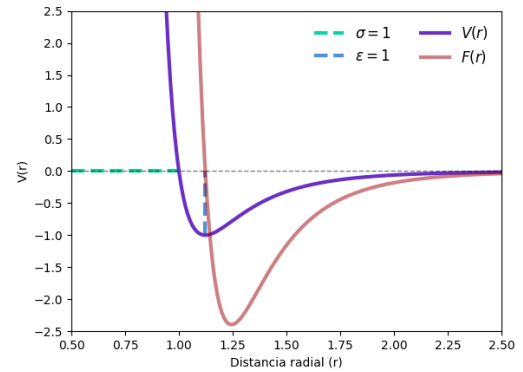


Figura 1. Potencial y fuerza de Lennard-Jones

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

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

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.

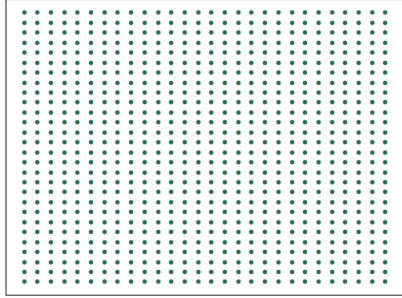


Figura 2. Posición inicial del sistema en dos dimensiones.

realizando una simulación de la dinámica con los parámetros establecidos en el tabla I se calculo 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 utilizo 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 calculo 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 3 se muestra la energía total del sistema a lo largo de la simulación para dos dimensiones (azul) y tres dimensiones (verde).

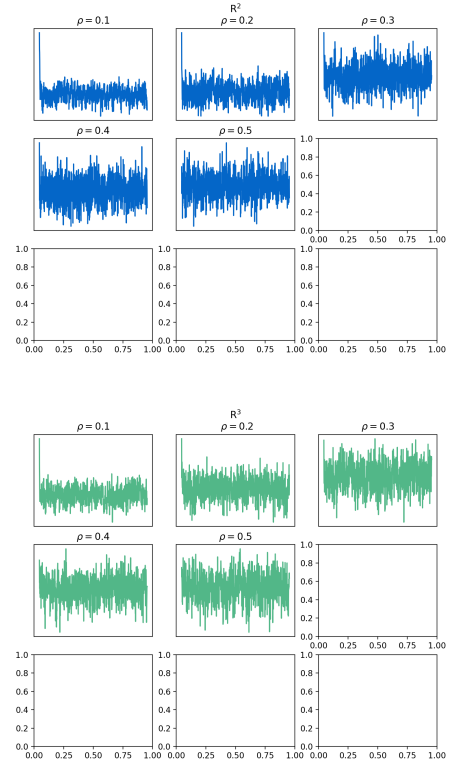


Figura 3. Energía total de los sistemas en dos y tres dimensiones a lo largo de la simulación

Con las ecuaciones 7 y 9 se calcularon las distribuciones radiales para dos y tres dimensiones mostradas en la figura 4

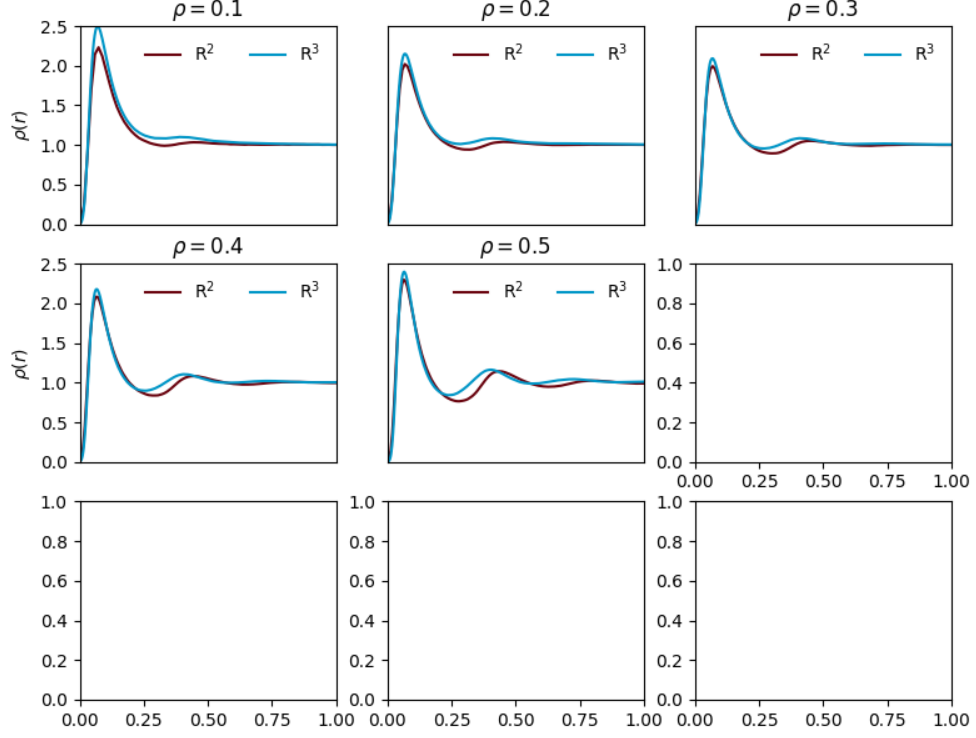


Figura 4. Distribución radial de la estructura

## VI. CONCLUSIONES

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed

accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Nulla malesuada porttitor diam. Donec felis erat, congue non, volutpat at, tincidunt tristique, libero. Vivamus viverra fermentum felis. Donec nonummy pellentesque ante. Phasellus adipiscing semper elit. Proin fermentum massa ac quam. Sed diam turpis, molestie vitae, placerat a, molestie nec, leo. Maecenas lacinia. Nam ipsum ligula, eleifend at, accumsan nec, suscipit a, ipsum. Morbi blandit ligula feugiat magna. Nunc eleifend consequat lorem. Sed lacinia nulla vitae enim. Pellentesque tincidunt purus vel magna. Integer non enim. Praesent euismod nunc eu purus. Donec bibendum quam in tellus. Nullam cursus pulvinar lectus. Donec et mi. Nam vulputate metus eu enim. Vestibulum pellentesque felis eu massa.

## VII. CÓDIGO

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

- 
- [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).