

Modelización del argón con potencial de Lennard-Jones

Un enfoque computacional

David Duran

Tabla de contenido

1. Introducción

2. Marco teórico

3. Procedimiento experimental

4. Resultados

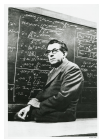
Resumen

En este artículo investigamos el uso del potencial de Lennard-Jones en el modelado de interacciones interatómicas en moléculas de argón. Empleamos métodos computacionales para calcular la energía potencial y destacamos los efectos de las fuerzas repulsivas y atractivas en diferentes números de átomos. Nos enfocamos en la velocidad de ejecución de los métodos computacionales utilizados en el estudio.

¿Por qué estamos haciendo esto?

- La función potencial es crucial para obtener la termodinámica de un fluido mediante la mecánica estadística.
- El potencial de LJ es ampliamente utilizado para fluidos simples y describe la interacción entre moléculas esféricas a través de ϵ y σ .
- Este estudio analiza las propiedades del potencial de LJ en la modelización de interacciones interatómicas en moléculas de argón mediante simulaciones de dinámica molecular.

Un viaje por la historia



Potencial LJ: propuesto por Lennard-Jones en 1931, sigue siendo ampliamente utilizado hoy en día. La forma del potencial de LJ fue deducida por London en 1930. Morse y Buckingham propusieron otros modelos, pero LJ con parámetros modificados es el más cercano a datos experimentales.

Potencial de LJ

Ecuación matemática

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

donde r es la distancia vectorial entre los átomos, σ es el tamaño de la partícula en el cual el potencial intermolecular entre dos átomos es cero y ϵ es la profundidad del pozo de energía, determinando la fuerza de la interacción entre los átomos.

Flujo de trabajo

El proceso consiste en:

1. Inicializar las posiciones y las velocidades
2. Calcular las fuerzas, aceleraciones y velocidades
3. Actualizar las posiciones

Utilización de un potencial de LJ truncado con $\sigma = 1$ y $\epsilon = 0,4$ para las interacciones entre partículas. Utilización del algoritmo de velocidad Verlet con un paso de tiempo de 0,005 para 500000 iteraciones. Reducción del coste computacional mediante la técnica del vecino más próximo. Temperatura constante con termostato.

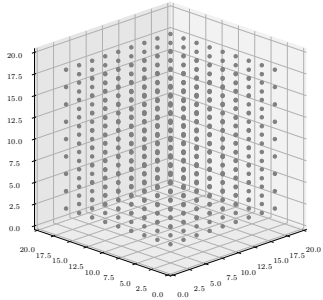
Unidades utilizadas

Cantidad	Unidad
Longitud (σ)	3,4 Å
Masa	68×10^{-27} kg
Energía	$4,14 \times 10^{-21}$ J
Tiempo	$1,38 \times 10^{-12}$ s
ϵ	0,4 kT (a T=300K)

Resultados

- La evolución del sistema puede observarse en la Figura 1, que muestra tanto el momento inicial como el final del sistema luego de 500,000 pasos de simulación.
- La Figura 2 indica que la energía total, potencial y cinética se mantuvieron estables a lo largo de las iteraciones, lo que indica que el termostato funcionó adecuadamente para mantener la temperatura constante.
- En la Figura 3, se muestra la distribución de la rapidez de las partículas a lo largo del tiempo, lo que nos permite evaluar la evolución del sistema en términos de la distribución de las velocidades de las partículas.

Posiciones iniciales de las partículas



Posiciones finales de las partículas

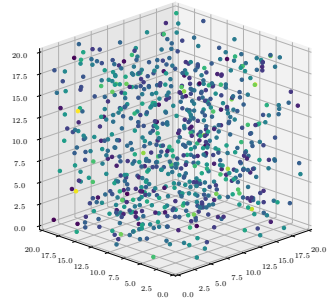


Figura: Momento inicial y final del sistema.

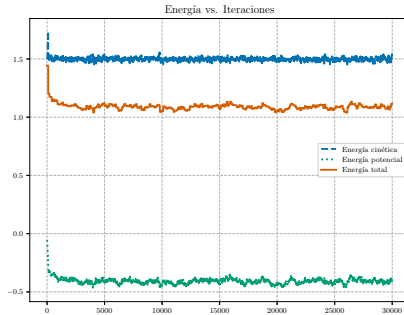


Figura: Energía total, potencial y cinética a lo largo de las iteraciones.

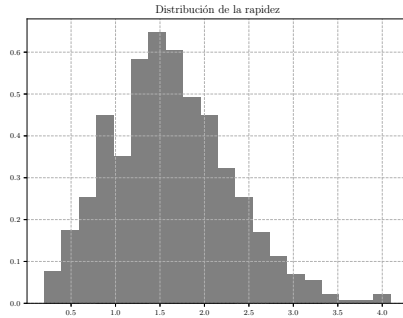


Figura: Distribución de la rapidez de las partículas a lo largo del tiempo.

References



J. E. Lennard-Jones (1924)

Zur Theorie und Systematik der Molekularkräfte

Zeitschrift für Physik 28(7), 613 – 637.



J. E. Lennard-Jones (1931)

Cohesion

Proceedings of the Physical Society 43(5), 461 – 482.



W. W. Wood and F. R. Parker (1957)

Monte Carlo Equation of State of Molecules Interacting with the Lennard-Jones Potential. I. A Supercritical Isotherm at about Twice the Critical Temperature

The Journal of Chemical Physics 27(3), 720 – 734.

Gracias