



## ESTUDO DO COMPORTAMENTO DE UM GÁS POR DINÂMICA MOLECULAR.

João Paulo Smykaluk (ICV-UNICENTRO), Eduardo Vicentini (Orientador),  
e-mail: [evicentini@unicentro.br](mailto:evicentini@unicentro.br).

Universidade Estadual do Centro-Oeste, Setor de Ciências Exatas e de Tecnologias, Departamento de Física, Guarapuava, Paraná.

**Palavras-chave:** equações do movimento, física computacional, simulação computacional.

### Resumo:

Neste trabalho desenvolveu-se o estudo das principais ferramentas computacionais utilizadas na simulação de Dinâmica Molecular, que é uma técnica computacional utilizada para compreender grupos de moléculas em termos de sua estrutura e das interações microscópicas entre elas. O comportamento dinâmico de um sistema molecular foi simulado e os resultados mostram a eficiência do programa desenvolvido.

### Introdução

A Dinâmica Molecular (DM) é fundamentada na Mecânica Clássica e fornece informações sobre o comportamento dinâmico dos átomos individuais que compõem o sistema. As moléculas são tratadas como um conjunto de átomos cujas interações podem ser descritas pelas leis de Newton.

Para a simulação em DM é selecionado um sistema modelo com  $N$  partículas e são solucionadas as equações do movimento de Newton até que suas propriedades macroscópicas, como temperatura e pressão, não mudem mais com o tempo.

Para um sistema atômico simples tem-se a equação

$$\mathbf{F}_i(t) = m_i \mathbf{a}_i, \quad (1)$$

onde  $\mathbf{F}_i$  é a força que atua sobre a partícula  $i$  num instante de tempo  $t$ , e  $\mathbf{a}_i$  é a aceleração do átomo  $i$  de massa  $m_i$ . Sendo definido o potencial  $V(r_i)$ , pode-se calcular as forças que atuam sobre cada átomo com a equação

$$\mathbf{F}_i(t) = -\nabla V(r_i). \quad (2)$$

A partir da Eq. (2), podem-se obter as velocidades e a mudança na posição do átomo. A integração das equações de movimento é realizada através de algoritmos, nos quais a integração é dividida em pequenos intervalos de tempo  $\Delta t$ .

Em DM, normalmente usa-se  $10^2 - 10^6$  partículas colocadas em uma caixa original que é replicada em todas as direções do espaço com condições de contorno periódicas.

O potencial de Lennard-Jones [3] (Eq. 3) é o mais utilizado para definir a energia potencial  $V$  entre duas partículas,



$$V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (3)$$

onde os parâmetros  $\varepsilon$  e  $\sigma$  tem dimensões de energia e comprimento, respectivamente.

A imposição de condições de contorno periódicas requer a avaliação das forças exercidas sobre cada molécula por todas as demais. No entanto, as interações com as partículas das caixas imagem também têm que ser incluídas. Para tratamento de ações de curto alcance, emprega-se o procedimento denominado imagem mínima, que é uma consequência do uso das condições de contorno periódicas. Nesse caso, é empregado o truncamento do potencial em um raio de corte esférico, que também tem por finalidade evitar a interação da partícula com sua própria imagem ou com a mesma partícula duas vezes [2].

Este trabalho teve como objetivo realizar um estudo sobre DM e desenvolver os algoritmos necessários para a realização de simulações de interações entre átomos de um gás.

## Materiais e Métodos

Neste trabalho foram realizados estudos sobre métodos computacionais envolvendo o sistema operacional Linux e a linguagem de programação Fortran. Também foram desenvolvidas diversas sub-rotinas em Fortran para a simulação em DM. Na simulação foi considerada uma caixa cúbica com condições de contorno periódicas. O potencial de Lennard-Jones foi utilizado para a interação entre as partículas.

Para que o problema ficasse independente da substância simulada, fez-se uso de grandezas reduzidas, obtidas a partir dos parâmetros  $\varepsilon$  e  $\sigma$  do potencial de Lennard-Jones (Eq. (3)). As grandezas reduzidas  $r^* = r/\sigma$  e  $E^* = E/\varepsilon$ , afetam outras grandezas como a temperatura e o tempo, mostradas na Tabela 1 para o caso do argônio.

**Tabela 1** – Transformação de grandezas reduzidas para grandezas reais do argônio para o potencial de Lennard-Jones.

| Grandeza           | Grandezas reduzidas  |                   | Grandezas reais                             |
|--------------------|----------------------|-------------------|---------------------------------------------|
| Temperatura        | $T^* = 1$            | $\leftrightarrow$ | $T = 119,8 \text{ K}$                       |
| Intervalo de tempo | $\Delta t^* = 0,005$ | $\leftrightarrow$ | $\Delta t = 1,09 \times 10^{-14} \text{ s}$ |
| Energia            | $E^* = 1$            | $\leftrightarrow$ | $E = 1,653 \times 10^{-21} \text{ J}$       |
| Distância          | $r^* = 1$            | $\leftrightarrow$ | $r = 3,405 \times 10^{-10} \text{ m}$       |

## Resultados e Discussão

Na simulação computacional foram utilizadas  $N = 200$  partículas, com posições iniciais uniformes em uma caixa de lado  $L^* = 27,14$ , determinado em função da densidade de partículas  $\rho^* = 0,01$ . As velocidades iniciais foram distribuídas de acordo com a distribuição de Maxwell [3]. Considerou-se uma temperatura inicial  $T^* = 0,5$ . Cada interação foi calculada em um



intervalo de  $\Delta t^* = 0,005$  e o tempo final de observação em  $t^* = 100$ . Foi considerado um raio de corte em  $r^* = 0,35$ . A massa das partículas foi considerada unitária.

O gráfico da Figura 1 apresenta a distribuição das partículas em  $t^* = 100$ . Ele possibilita verificar a estabilidade do programa utilizado, observando que todas as partículas continuam localizadas dentro da caixa original. Na figura, os lados da caixa são tomados como referência para os eixos ortogonais  $x$ ,  $y$  e  $z$ , com origem no centro da caixa.

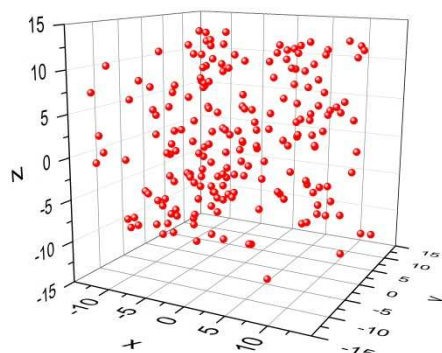


**Figura 1** – Distribuição das partículas na célula unitária cúbica com lado igual a 27,14, em unidades reduzidas, no tempo de observação  $t^* = 100$ .

A Figura 2 mostra a distribuição radial das partículas, calculada por uma média temporal, tomada em todos os intervalos de tempo, da distância radial média de cada partícula com todas as outras. A interrupção em  $r^* = 3,5$  é o raio de corte para a ação do potencial de Lennard-Jones. O outro decaimento acentuado em  $r^* < 1$  é uma consequência da parte repulsiva do potencial. A concentração de partículas próxima de  $r^* = 1$ , indica que algumas partículas ficam confinadas no potencial, mas a maioria delas se distribuem homogeneamente para  $r^* > 1$ , em uma configuração coerente a de um gás.

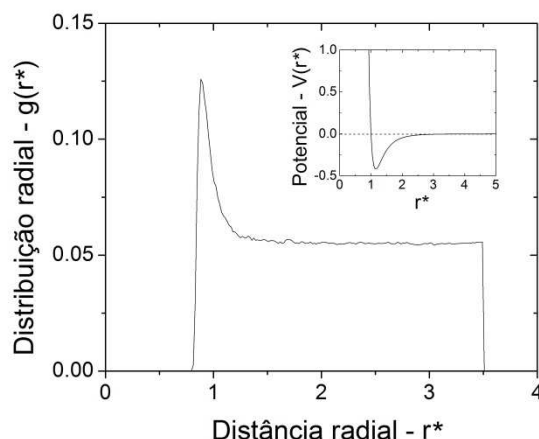


**Figura 2** – Distribuição radial das partículas em unidades reduzidas. A posição final em  $r^* = 3,5$  se refere ao raio de corte utilizado nas simulações. A figura inserida mostra o potencial de Lennard-Jones também



em unidades reduzidas.

Os valores da temperatura e da energia total média por partícula, em cada intervalo de tempo, foram calculados para verificar a estabilidade do programa desenvolvido e estão representados nos gráficos da Figura 3. A temperatura apresenta um valor estável em torno de  $T^* = 0,496$  e a energia total possui um valor médio de  $E^* = 8,24$  com maiores flutuações. Sendo a temperatura relacionada à energia cinética média, podemos inferir que a energia potencial média é responsável pelas flutuações observadas na energia total e, os grandes valores positivos se referem a partículas que estão muito próximas, com  $r^* < 1$  (veja potencial na Figura 2).

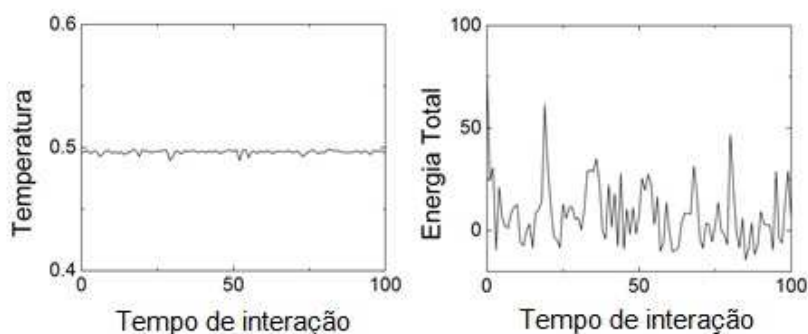


**Figura 3** – Temperaturas e energias totais médias observadas em cada intervalo de tempo de interação.

### Conclusões

No trabalho realizado foram desenvolvidos estudos sobre sistema operacional Linux, linguagem de programação Fortran e simulações computacionais por dinâmica molecular. Foram desenvolvidas sub-rotinas para a simulação computacional de moléculas interagentes através do potencial de Lennard-Jones. Uma simulação foi realizada para um gás com 200 moléculas e foi observado o comportamento da configuração final das partículas, da distribuição radial, da temperatura e da energia total. Os resultados mostram que os programas produzem resultados coerentes com o previsto na literatura [3], estando pronto para ser usado em estudos futuros que envolvem este método de simulação.

### Agradecimentos

O autor e o orientador agradecem ao MEC/SESu pelo apoio financeiro.

### Referências

- Namba, A.M.; Silva, V.B. da; Silva, C.H.T.P. Dinâmica molecular: teoria e aplicações em planejamento de fármacos, *Ecl. Quím.*, vol. 33, 2008, 13.
- Allen, M. P. Introduction to Molecular Dynamics Simulation. In: Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins, Lectures Notes. NIC

XVII SEMANA  
de  
**INICIAÇÃO CIENTÍFICA**



*Series*, vol. 23, 2004, 1.

Frenkel, D.; Smit, B. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. Academic Press, Amsterdam, 1996; p. 63.