

## SIMULAÇÃO DE DINÂMICA MOLECULAR USANDO O POTENCIAL DE LENNARD-JONES

**Thales Luis Rodrigues Sabino** - tluis@ice.ufjf.br

**João Paulo Scoralick de Oliveira** - jpscoralick@ice.ufjf.br

**João Paulo Peçanha** - joaopaulo@ice.ufjf.br

**Josué dos Santos Barroso** - josue.barroso@ice.ufjf.br

**Rafael Barra de Almeida** - rafaelbarra@ice.ufjf.br

**Marcelo Bernardes Vieira** - marcelo.bernardes@ufjf.edu.br

**Marcelo Lobosco** - marcelo.lobosco@ice.ufjf.br

Departamento de Ciência da Computação

**Sócrates de Oliveira Dantas** - dantas@fisica.ufjf.br

Departamento de Física

Universidade Federal de Juiz de Fora, Cidade Universitária

CEP: 36036-330 - Juiz de Fora, MG, Brasil

**Vitor Rafael Coluci** - coluci@ifi.unicamp.br

Instituto de Física Gleb Wataghin

Universidade Estadual de Campinas

Cidade Universitária Zeferino Vaz

CEP: 13083-970 - Campinas, SP, Brasil

***Resumo.** Um sistema de partículas pode ter o seu comportamento determinado, em função do tempo, pelo estudo da dinâmica molecular. Neste trabalho é apresentado um modelo físico-matemático-computacional que utiliza simulação de dinâmica molecular, usando o potencial de Lennard-Jones, para a realização de cálculos de interações intermoleculares de argônio. Os resultados obtidos com o simulador desenvolvido neste trabalho constituem uma base sólida para análises das propriedades termodinâmicas desse tipo de sistema físico. A interatividade proporcionada pela interface gráfica do simulador contribui para um melhor entendimento do fenômeno físico estudado.*

***Palavras-Chave:** Dinâmica molecular, Potencial de Lennard-Jones, Simulação de fluidos.*

### 1. INTRODUÇÃO

A Dinâmica Molecular (DM) é uma forma de simulação computacional cujo foco principal é o estudo do comportamento de um sistema de partículas em função do tempo. Assim, por meio da integração das equações de movimento para um sistema, determinam-se as propriedades de equilíbrio ou de transporte que o caracterizam.

O conceito da Dinâmica Molecular foi proposto por (Alder & Wainwright, 1959) para simular o comportamento mecânico de sistemas moleculares. A base teórica da DM engloba vários dos importantes resultados produzidos por grandes nomes da Mecânica - Euler, Hamilton, Lagrange e Newton (Rapaport, 1996).

O conhecimento do potencial de interação entre as partículas e as equações de movimento que regem sua dinâmica são os elementos mais relevantes para realização de uma simulação

de DM. O movimento das partículas é geralmente descrito pela mecânica Newtoniana. Para uma simulação, o potencial adotado pode ser simples, como no caso do potencial gravitacional em interações de partículas cósmicas, ou possuir mais de um termo, tal qual na descrição de interações entre átomos e moléculas. Dessa forma, a simulação computacional nos permite extrair várias informações do sistema como um todo, permitindo, assim, o cálculo de diversas propriedades.

A modelagem computacional nos oferece não apenas formas de resolver cálculos matemáticos, mas também e, sobretudo, a criação de laboratórios virtuais no qual estudos podem ser realizados de forma muito próxima à realidade. Assim, a simulação em ambientes computacionais permite que pesquisadores possam ser capazes de entender o comportamento da matéria em uma escala que não pode ser naturalmente observada, ou ainda em situações físicas impossíveis de ser alcançadas em laboratórios (como, por exemplo, altas pressões ou temperaturas, número de partículas envolvidas, etc.). Dessa forma, a compreensão e a observação de um problema podem ser feitas de forma fidedigna e eficaz.

O objetivo principal deste trabalho é a implementação de um simulador que utilize o potencial de Lennard-Jones (LJ) para o cálculo das interações intermoleculares de átomos de argônio no estado líquido, fornecendo, dessa forma, instrumentos para análises físicas.

A organização deste trabalho é a seguinte: na Seção 2 são apresentados trabalhos correlatos; na Seção 3 é apresentado o modelo físico-matemático utilizado como referência principal na construção do simulador de dinâmica molecular proposto; na Seção 4 o modelo computacional, a partir do qual foi realizada a implementação do simulador, é apresentado; na Seção 5 são descritos alguns resultados experimentais obtidos a partir do simulador; por fim, a Seção 6 apresenta as conclusões obtidas com este trabalho e propostas de trabalhos futuros.

## **2. TRABALHOS CORRELATOS**

O potencial de LJ pode ser usado para simular o comportamento dos mais diversos tipos de sistemas. Em (Craig, 2007), o potencial é usado para simular a difusão de massa em um sistema geral modelado pelo potencial de LJ. Interações intermoleculares em metais também podem ser modeladas usando este potencial (Lin et al., 2006) (Qi et al., 2004).

Em (Galbraith & Hall, 2006), um estudo aprofundado sobre o estado de equilíbrio em sistemas líquido-vapor de misturas diatômicas é realizado usando o método de Monte Carlo. O propósito do estudo do artigo citado é semelhante ao proposto neste trabalho: entender como as interações intermoleculares afetam os diagramas de fase de misturas, ou no caso deste trabalho, de elementos. A discussão sobre resultados numéricos obtidos da combinação do método de Monte Carlo com o potencial de LJ, para simular o comportamento de fluidos (ainda em estado líquido), pode ser encontrada em (Zhang, 2006).

Algumas vezes o potencial de LJ é alterado com a finalidade de se obter uma representação mais adequada a uma determinada situação. Em (Deiters & Randzio, 1995), o modelo é truncado no valor mínimo que é deslocado ao valor zero, dessa forma, o modelo torna-se puramente repulsivo. Essa abordagem teve o objetivo de modelar o comportamento de suave repulsão nas interações entre certas moléculas. No presente trabalho, a única truncagem que é feita no potencial é a consideração de uma distância de corte, o que é detalhado na seção referente ao potencial. É importante citar que o modelo físico que será descrito nas próximas seções trata o problema da simulação de DM de uma forma mais genérica, o que garante uma maior adaptação a um grande número de sistemas, tornando-se mais abrangente.

### 3. MODELAGEM FÍSICO-MATEMÁTICA

As propriedades físicas da matéria estão relacionadas diretamente com a forma no qual os átomos (moléculas) interagem entre si e com o ambiente. Um par de átomos sempre estará sujeito a forças intermoleculares associadas, principalmente, à distância que separa seus núcleos atômicos. A partir disso, dois tipos de forças (atração e repulsão) podem ser observadas a todo momento. Sabe-se que, a grandes distâncias, pares de átomos exercem, mutuamente, uma força de atração relacionada, principalmente, ao movimento de suas nuvens eletrônicas (forças de van der Waals) e, a pequenas distâncias, observa-se uma força repulsiva causada principalmente pela sobreposição dos orbitais eletrônicos (princípio de exclusão de Pauli) (Chiquito & de Almeida, 1999). Com a finalidade de analisar esse comportamento de forma analítica e numérica, podem ser utilizadas funções potenciais associadas a essas forças que descrevem esse comportamento intermolecular.

#### 3.1 Potencial de Lennard-Jones

O melhor modelo matemático que descreve a interação intermolecular mencionada anteriormente é o potencial de LJ. Esse modelo foi proposto por John Lennard-Jones em 1924 (Lennard-Jones, 1924), originalmente, para modelar argônio líquido. O potencial de LJ é comumente usado para simular o comportamento de gases nobres a baixas densidades. Para um par de átomos  $i$  e  $j$  localizados em  $\mathbf{r}_i$  e  $\mathbf{r}_j$ , o potencial de LJ é escrito como:

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

onde  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  e  $r_{ij} \equiv |\mathbf{r}_{ij}|$ . Na equação (1), o parâmetro  $\epsilon$  especifica a intensidade da interação e  $\sigma$  define a distância finita onde o potencial é nulo (Rapaport, 1996).

A resolução numérica do potencial em si não apresenta grandes desafios. Contudo, o seu uso geralmente está associado a outras características físicas que o sistema pode apresentar. Mudanças na posição espacial, velocidade e a aceleração dos átomos são exemplos de características que influenciam diretamente no comportamento do sistema como um todo. A partir da força exercida sobre cada átomo, todas as características citadas anteriormente podem ser obtidas. A força  $\mathbf{F}$  correspondente a  $V(\mathbf{r})$  é estabelecida em função da energia potencial relacionada com a posição deste átomo:

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}) = -\frac{d}{d\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{r}} \quad (2)$$

Como o potencial de interação intermolecular  $V(\mathbf{r})$  é conhecido, a força exercida sobre um átomo  $i$  pode ser calculada de forma simples. Logo, a força que um átomo  $j$  exerce sobre o átomo  $i$  será dada por:

$$\mathbf{f}_{ij} = \left( 48 \frac{\epsilon}{\sigma^2} \right) \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] \mathbf{r}_{ij} \quad (3)$$

Dada a força resultante aplicada a uma molécula, a posição de  $i$  em um instante de tempo qualquer pode ser determinada através da integração das equações de movimento obtidas a partir da segunda Lei de Newton. Portanto, para  $N$  átomos presentes em um volume fechado e limitado e  $N$  constante, tem-se:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{f}_{ij} \quad (4)$$

onde  $m_i$  corresponde à massa molecular da partícula  $i$ .

Utilizando as posições e velocidades de todas as partículas em um dado instante de tempo, juntamente com o potencial de interação intermolecular  $V(\mathbf{r})$ , pode-se determinar os estados passados ou futuros (posição e velocidade) de todas as partículas do sistema em qualquer tempo.

### 3.2 Medidas de Propriedades Termodinâmicas

A resolução numérica da equação do movimento de Newton (4) resulta na determinação da posição de cada átomo em um determinado instante de tempo.

Energia e pressão são duas propriedades da termodinâmica elementar que são facilmente medidas em um sistema de partículas via DM. Ambas são expressas em termos das variáveis temperatura e densidade do sistema,  $T$  e  $\rho$  respectivamente. A medição dessas propriedades durante uma simulação de DM resulta na obtenção do comportamento do sistema em uma escala macroscópica. Esse comportamento é usado para determinar propriedades do sistema que não podem ser observadas somente com a avaliação da trajetória de cada átomo ao longo do tempo.

A pressão é definida em termos da expressão do virial (Hansen & McDonald, 1986):

$$PV = NT + \frac{1}{d} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{f}_i \right\rangle \quad (5)$$

onde  $d$  é a dimensão do sistema ( $d = 1$ , sistema unidimensional;  $d = 2$ , sistema bidimensional; e  $d = 3$ , sistema tridimensional). A energia cinética  $E_k$  e o potencial  $E_u$ , médios por átomo, são dados por (Rapaport, 1996):

$$E_k = \frac{1}{2N} \cdot \sum_{i=1}^N m \mathbf{v}_i^2 \quad (6)$$

$$E_u = \frac{4}{N} \sum_{1 \leq i < j < N} \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (7)$$

A temperatura instantânea  $T_i$  do sistema em um instante de tempo qualquer é dada por:

$$T_i = \frac{1}{dN} \cdot \sum_i^N \mathbf{v}_i^2 \quad (8)$$

O calor específico  $C_v$  para uma temperatura  $T$  é calculado em função da flutuação de  $E_k$  ao longo tempo, ou seja:

$$C_v = \frac{N}{K_b T^2} \langle \delta E^2 \rangle \quad (9)$$

onde  $K_b$  é a constante de Boltzmann e  $\langle \delta E^2 \rangle = \langle E_k^2 \rangle - \langle E_k \rangle^2$  é a flutuação da energia cinética ao longo do tempo para uma temperatura  $T$ . A variação do calor específico com o aumento ou com a redução da temperatura do sistema leva à determinação de uma característica muito importante da matéria, que é a temperatura na qual ocorre a transição de fase em um sistema. Tal temperatura indica quando um sistema muda da fase sólida para a líquida, ou da fase líquida para a fase vapor. Uma variação brusca no valor do calor específico indica uma transição de fase naquela temperatura.

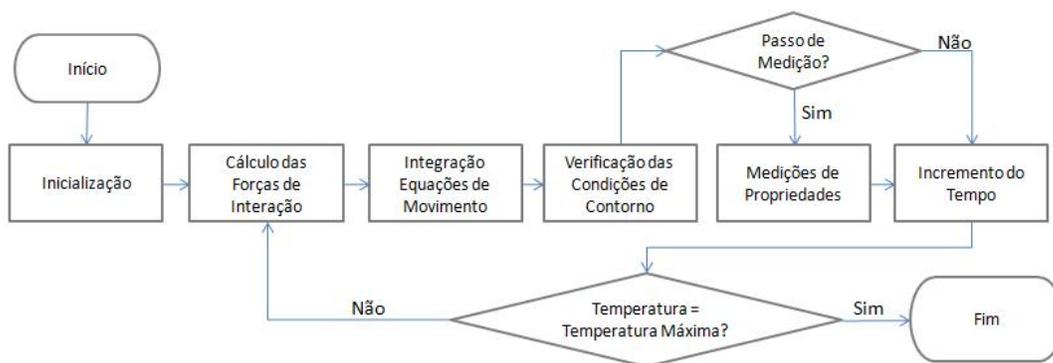
#### 4. MODELAGEM COMPUTACIONAL

A implementação da simulação de um modelo de DM segue cinco passos básicos. O primeiro passo consiste na inicialização do sistema: posições são escolhidas para cada uma das moléculas que farão parte da simulação. Também é escolhido um intervalo de tempo  $\delta t$  pequeno o suficiente para que o método de integração escolhido conserve a energia do sistema ao longo do tempo. O segundo passo diz respeito ao cálculo da força de interação intermolecular: a força exercida em cada uma das moléculas presentes na simulação é computada neste passo. Também é possível determinar a aceleração de cada átomo da seguinte maneira:

$$\mathbf{a}_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \quad (10)$$

onde  $\mathbf{F}_i$  é a força resultante aplicada e  $m_i$  é a massa da molécula  $i$ . O terceiro passo consiste na integração da equação 4. Novas posições e velocidades são determinadas para cada molécula do sistema. As condições de fronteira escolhidas devem ser verificadas nesse ponto para que não haja uma violação das mesmas. O quarto passo é incrementar o tempo corrente:  $t = t + \delta t$ . O quinto passo consiste na verificação da condição de parada da simulação. A partir deste passo, são repetidos os quatro últimos passos até que a condição de parada seja alcançada.

O conceito de DM se refere à resolução das equações de movimento (Eq. 4) que regem o sistema. O cálculo das propriedades do sistema é feito antes do quarto passo de simulação e existe em consequência da resolução das equações de movimento.



**Figura 1:** Fluxograma dos Passos da Simulação

A Figura 1 apresenta os passos da simulação em forma de fluxograma.

#### 4.1 Unidades Adimensionais

Em sistemas físicos moleculares é comum o uso de *Angstroms* ( $10^{-10}m$ ) como unidade de comprimento. Contudo, a limitação da representação numérica pelos sistemas de computação

torna o uso de números dessa ordem de grandeza prejudicial à convergência dos cálculos envolvidos na simulação. Para contornar esse problema, é feito o uso de unidades adimensionais com as quais todas as quantidades físicas serão expressas. Existem várias razões para se fazer uso de tal artifício: a) facilidade de trabalhar com números próximos da unidade, b) eliminação de problemas de *underflow* e *overflow* por parte dos sistemas de computação e c) simplificação das equações de movimento e energia (Rapaport, 1996).

As unidades adimensionais mais adequadas para sistemas que fazem uso do potencial de LJ (Eq.1) são baseadas na escolha de  $\sigma$  como unidade de comprimento,  $m$  como unidade de massa e  $\epsilon$  como unidade de energia. A escolha desses parâmetros simplifica o cálculo da força de interação intermolecular e energia para uma molécula  $i$ . Sabendo que agora  $m = 1$ ,  $r_{ij} = r_{ij} \times \sigma$ , a equação 4 é reescrita como:

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = 48 \sum_{j \neq i} \left( r_{ij}^{-14} - \frac{1}{2} r_{ij}^{-8} \right) \mathbf{r}_{ij} \quad (11)$$

As equações das energias potencial e cinética, por molécula, em termos das unidades adimensionais, ficam:

$$E_k = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i^2 \quad (12)$$

$$E_u = \frac{4}{N} \sum_{1 \leq i < j < N} (r_{ij}^{-14} - r_{ij}^{-8}) \quad (13)$$

Para simular um sistema de argônio líquido, as relações entre as unidades adimensionais e as unidades físicas reais são as seguintes (Rapaport, 1996): distâncias são medidas em função de  $\sigma = 3.4$ ; a unidade de energia é definida por  $\epsilon/K_b = 120K$ , sabendo que  $K_b = 1$ , as unidades de energia ficam em função de  $\epsilon = 8.314J/mole$ ; sabendo que a massa atômica do argônio é  $m = 39.95 \times 1.6747 \times 10^{-27} kg$ , então a unidade de tempo adimensional corresponde a  $2.161 \times 10^{-12} s$ . Tipicamente, um  $\delta t = 0.005$  (em unidades adimensionais) é utilizado como passo de tempo (da ordem de 10 femtosegundos). A densidade do argônio líquido é  $0.942g/cm^3$ . Para uma região cúbica de lado  $L$ , contendo  $N$  átomos, implica que  $L = 4.142N^{1/3}$ , o que em unidades adimensionais fica  $L = 1.128N^{1/3}$ .

## 4.2 Inicialização do sistema

A inicialização do sistema para simulação consiste em atribuir posição e velocidade para cada um dos átomos do sistema. A posição é atribuída de forma a distribuir os átomos pelo volume de simulação de maneira que ocupem espaços em uma grade regular, normalmente cúbica, de forma a obter a densidade desejada. A escolha das velocidades também é feita de forma que o centro de massa do sistema fique em repouso, já que no instante de tempo  $t = 0s$  o momento linear total do sistema é nulo.

A inicialização da velocidade é feita em três passos. O primeiro consiste no cálculo do módulo da velocidade de cada molécula  $v_{mag}$ , dado por (em unidades adimensionais):

$$v_{mag} = \sqrt{\frac{dK_b T}{mM}} = \sqrt{dT \left( 1 - \frac{1}{N} \right)} \quad (14)$$

onde  $M$  é a massa total do sistema. Considera-se que o sistema é composto por  $N$  átomos de massa  $m$ . O segundo passo é o cálculo de um vetor unitário aleatório que representa a direção da velocidade de cada molécula. Os vetores unitários podem ser gerados de forma simples. Dados dois números aleatórios  $\theta$  e  $\phi$ , um vetor unitário aleatório associado a um átomo  $i$ ,  $\mathbf{v}_i$  é definido como:

$$v_{i_x} = \sin \theta \cos \phi \quad (15a)$$

$$v_{i_y} = \sin \theta \sin \phi \quad (15b)$$

$$v_{i_z} = \cos \theta \quad (15c)$$

Para um sistema bi-dimensional, basta eliminar a componente  $v_{i_z}$  do vetor  $v_i$ . O terceiro e último passo consiste no escalamento do vetor unitário com o valor de  $v_{mag}$ . O vetor obtido através desse escalamento é associado ao átomo  $i$ .

### 4.3 Método de integração numérica *Leapfrog*

Muitos métodos de integração numérica estão disponíveis para resolução das equações de movimento. Vários são rapidamente dispensáveis devido ao alto poder computacional exigido. O método de integração não pode ser mais custoso do que a avaliação da força de interação intermolecular. Esse custo computacional extra de alguns métodos eleva o tempo de simulação para níveis indesejáveis. Um método de integração simples muito usado em simulações de DM é o método *Leapfrog* (Beeman, 1976). Apesar de sua simplicidade, este método possui excelentes propriedades de conservação de energia. O algoritmo do método *Leapfrog* possui dois passos. Primeiro, ele calcula as velocidades no tempo  $(t + 1/2\delta t)$ , as posições então são calculadas no tempo  $(t + \delta t)$  a partir das velocidades calculadas:

$$v_{xi}(t + \delta t/2) = v_{xi}(t - \delta t/2) + h a_{xi}(t) \quad (16a)$$

$$r_{xi}(t + \delta t/2) = r_{xi}(t) + h v_{xi}(t + \delta t/2) \quad (16b)$$

Caso seja necessário saber a velocidade no tempo em que as coordenadas são calculadas, então pode-se usar:

$$v_{xi}(t) = v_{xi}(t - \delta t/2) + (\delta t/2) a_{xi}(t) \quad (17)$$

O nome *Leapfrog* vem do fato de que coordenadas e velocidades não são calculadas simultaneamente, o que caracteriza uma desvantagem desse método.

### 4.4 Considerações para medição das propriedades termodinâmicas

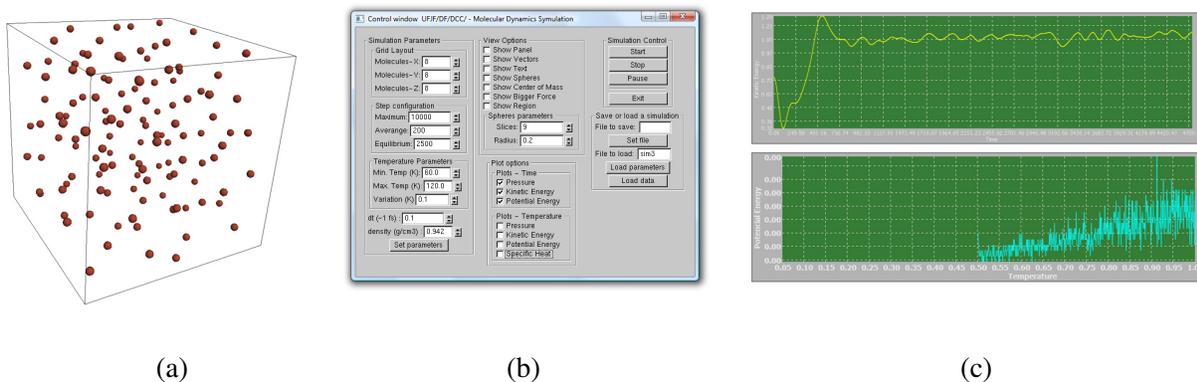
Na aplicação desenvolvida, o sistema é iniciado com uma temperatura nominal. A cada valor de temperatura, o sistema passa por duas fases: termalização e produção. Antes que possam ser feitas medições das propriedades do sistema, é necessário que o mesmo atinja o equilíbrio térmico, ou seja, que a temperatura real do sistema tenha pouca variação em relação à temperatura nominal. Essa fase é chamada no presente trabalho de fase de termalização. Após esta, tem-se início a fase de produção, que é caracterizada pela amostragem das propriedades do sistema. Ambas as fases são delimitadas por um número definido de iterações. As medições são espaçadas para que cada valor amostrado não tenha dependência com o valor anterior, isto é, para que não haja correlação estatística entre estes dois valores de propriedades.

Ao término da fase de produção da temperatura corrente, é feita a média entre as medidas de propriedades efetuadas e, então, a temperatura sofre uma variação. O sistema deverá passar novamente pelas fases de termalização e de produção para essa nova temperatura. Esse processo é repetido até que o sistema alcance a temperatura final.

## 5. RESULTADOS

Para o desenvolvimento desse trabalho, foi implementado o modelo físico-matemático juntamente com os aspectos computacionais descritos previamente. Os parâmetros de simulação, como temperaturas inicial e final, o número de iterações para as fases de termalização e produção, o intervalo entre as medições e o valor da variação de temperatura são definidos pelo usuário no início do processo.

Para o uso correto e simplificado do simulador desenvolvemos uma interface gráfica que permite de forma fácil a configuração dos parâmetros previamente descritos (Figura 2.b). Em conjunto com esta, foi desenvolvido um visualizador que permite acompanhar a trajetória das moléculas ao longo do tempo (Figura 2.a). Resultados numéricos em tempo real podem ser observados durante a simulação através de gráficos (Figura 2.c).

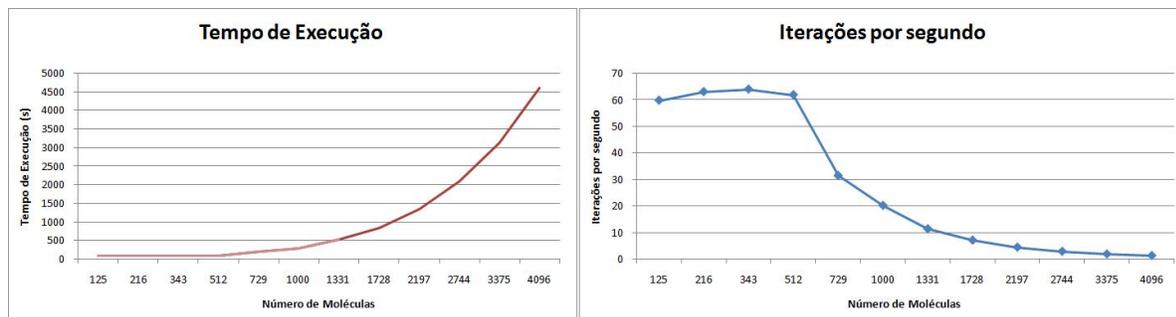


**Figura 2:** Representação gráfica do modelo implementado: (a) os átomos são representados como esferas no espaço contidos em um volume de simulação, (b) interface de controle do usuário e (c) gráficos gerados e atualizados em tempo de execução com resultados numéricos preliminares

Para a análise do desempenho computacional do modelo implementado foram realizados alguns testes. As simulações foram realizadas em um processador Intel<sup>®</sup> Core<sup>™</sup> 2 Quad Q8300 de 2.5GHz com sistema operacional Windows<sup>®</sup> Vista<sup>™</sup> Ultimate 64 bits. Analisaremos o comportamento computacional apresentado pelo simulador. O primeiro teste realizado consistiu em medir o tempo de execução em função do aumento do número de elementos no sistema. Os resultados são mostrados na Figura 3.a. Nesse teste foram usados 2000 passos para termalização e 4000 passos de produção com intervalo de medição de 200 passos. Até 512 moléculas pode ser observado que o tempo de execução se manteve praticamente constante. O baixo número de moléculas no sistema não evidencia, até então, o fator quadrático presente no cálculo da força de interação (Eq.3). A medida que o sistema tem seu tamanho aumentado, o cálculo da força de interação intermolecular torna-se naturalmente mais custoso. Isso é observado devido ao número de operações necessárias para se calcular todas as interações que ocorrem no sistema. Para que uma iteração seja completada, o número de cálculos é proporcional ao número de moléculas no sistema, portanto, o acréscimo de elementos implica em um aumento gradativo no número de cálculos a serem realizados e, conseqüentemente, no aumento do tempo de execução.

O número de iterações executadas por segundo é apresentado na Figura 3.b. Neste gráfico o

desempenho do simulador é avaliado em função do tamanho do sistema. Novamente podemos observar uma queda no desempenho do simulador quando o número de moléculas torna-se superior a 512.



**Figura 3:** Gráficos de desempenho. O gráfico da esquerda (a) representa o aumento do tempo de computação a medida que mais moléculas são acrescentadas à simulação. O gráfico da direita (b) representa o número de iterações executadas por segundo.

## 6. CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

A Dinâmica Molecular é um método muito eficaz para simular o comportamento de vários tipos de sistemas. Neste trabalho, a simulação de DM foi utilizada para as interações intermoleculares de átomos de argônio no estado líquido, com a utilização do potencial de LJ. O emprego de simuladores, como o descrito e implementado neste trabalho, se torna essencial no estudo do comportamento intermolecular dos mais diversos tipos de compostos e elementos, visto que análises experimentais nesse tipo de sistema apresentam características não-triviais e que, em alguns casos, podem ser consideradas financeiramente inviáveis.

Apesar do sucesso obtido com o simulador, os sistemas de simulação apresentam limitações quanto ao desempenho computacional, uma vez que os modelos físicos e matemáticos utilizados neste trabalho requerem um alto número de elementos no sistema para que a simulação se aproxime o tanto quanto possível da realidade. Visto que o tempo de resolução é proporcional ao tamanho do sistema, melhorias podem ser feitas a fim de se potencializar os cálculos citados, garantindo que estes sejam realizados de forma mais rápida. Portanto, se faz necessária a utilização de computação de alto desempenho.

Uma das propostas de trabalhos futuros é o desenvolvimento de um novo modelo computacional para o simulador, que seja capaz de operar em ambientes computacionais multinucleados, por meio de uma implementação que utilize tanto multiprocessadores, quanto placas gráficas de propósito geral (*General-purpose computing on Graphics Processing Units* - GPGPU). Para tal, a tecnologia CUDA (*Compute Unified Device Architecture*) (NVIDIA, 2007) poderá ser empregada.

### Agradecimentos

Os autores agradecem à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), a UFJF e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) pelo suporte dado ao desenvolvimento deste trabalho.

### REFERÊNCIAS

- Alder, B. J. & Wainwright, T. E., 1959. Studies in molecular dynamics. i. general method. *The Journal of Chemical Physics*, vol. 31, n. 2.
- Beeman, D., 1976. Some multistep methods for use in molecular dynamics calculations. *Journal of Computational Physics*, vol. 20, pp. 130+.
- Chiquito, A. J. & de Almeida, N. G., Junho, 1999. O potencial de lennard-jones: Aplicação à moléculas diatômicas. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 21, n. 2.
- Craig, H. A., 2007. Method development of dynamic mass diffusion monte carlo using lennard-jones clusters.
- Deiters, U. & Randzio, S., 1995. The equation of state for molecules with shifted lennard-jones pair potentials. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 103, n. 2, pp. 199 – 212.
- Galbraith, A. L. & Hall, C., 2006. Vapor-liquid phase equilibria for mixtures containing diatomic lennard-jones molecules. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 241, n. 1-2, pp. 175 – 185. A Festschrift in Honor of John M. Prausnitz.
- Hansen, D. P. & McDonald, I. R., 1986. *Theory of Simple Fluids*. Academic Press.
- Lennard-Jones, J. E., 1924. Cohesion. *Proceedings of the Physical Society*, vol. A 106, pp. 461–482.
- Lin, T., Bian, X., & Jiang, J., 2006. Relation between calculated lennard-jones potential and thermal stability of cu-based bulk metallic glasses. *Physics Letters A*, vol. 353, n. 6, pp. 497 – 499.
- NVIDIA, 2007. Nvidia cuda programming guide. Technical report, NVIDIA Corporation.
- Qi, W. H., Wang, M. P., & Hu, W. Y., 2004. Calculation of the cohesive energy of metallic nanoparticles by the lennard-jones potential. *Materials Letters*, vol. 58, n. 11, pp. 1745 – 1749.
- Rapaport, D. C., 1996. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, New York, NY, USA.
- Zhang, Y., 2006. Monte carlo simulation results of some basic physical properties of lennard-jones fluids. *Journal of Molecular Liquids*, vol. 128, n. 1-3, pp. 96 – 98.

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION USING LENNARD-JONES POTENTIAL

**Abstract.** *A particle system can have its behavior, as a function of time, established through molecular dynamics simulations. This work presents a physical-mathematical-computational model which employs molecular dynamics simulation, using Lennard-Jones potential, in order to calculate intermolecular argon interactions. The results obtained by the use of the simulator developed in this work provide a solid base for analyzing the thermodynamics properties of this physical system. The interactivity provided by the graphic interface of the simulator contributes to a better understanding of the physical phenomena studied.*

**Keywords:** *Fluid simulation, Molecular dynamics, Lennard-Jones potential.*