



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº 17.228 de 25/11/2016



PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXIX SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS SEMANA NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA - 2025

O Potencial de Lennard-Jones na Modelagem de Interações Interatômicas

Iury Ferreira Lima¹; Franz A. Farias²; Álvaro Santos Alves²

1. Iury Ferreira Lima, PIBIC/FAPESB, FÍSICA, e-mail: iuryf3r@gmail.com

2. Álvaro Santos Alves, DEPARTAMENTO DE FÍSICA, e-mail: asa@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Potencial de Lennard-Jones; Forças Intermoleculares;
Simulação Computacional

INTRODUÇÃO

O estudo das forças intermoleculares é fundamental para a compreensão das propriedades macroscópicas da matéria, tais como pontos de fusão e ebulição, tensão superficial, viscosidade e os estados de agregação (sólido, líquido e gasoso). No centro deste estudo está a necessidade de descrever matematicamente a energia potencial de interação entre dois átomos ou moléculas neutras. Dentre os diversos modelos propostos, o potencial de Lennard-Jones (LJ) destaca-se como um dos mais bem-sucedidos, amplamente utilizado e pedagogicamente ilustrativo (CURTISS et al., 1954).

Proposto inicialmente pelo físico britânico John Edward Lennard-Jones em 1924 (LENNARD-JONES, 1924), este potencial empírico oferece uma descrição precisa e computacionalmente eficiente para as interações em gases nobres e serve como um ponto de partida para modelagens mais complexas em líquidos e sólidos simples. A sua forma captura a natureza essencial da interação entre partículas neutras: uma repulsão de curto alcance e uma atração de longo alcance.

O objetivo deste trabalho é explorar o potencial de Lennard-Jones, desde o seu contexto histórico até a sua formulação matemática completa. Serão analisadas as suas características principais, a interpretação física de cada termo e os parâmetros que o definem, culminando em uma discussão sobre a sua aplicabilidade e suas limitações.

CONTEXTO HISTÓRICO

No início do século XX, a teoria cinética dos gases e os recentes estudos da mecânica quântica demandavam um modelo de potencial que pudesse explicar desvios do gás ideal, particularmente o fenômeno da condensação. Modelos puramente atrativos ou repulsivos eram insuficientes. LENNARD-JONES (1931) buscou uma função que incorporasse tanto a atração devido às forças de dispersão de London, um efeito quântico, quanto à repulsão, consequência do princípio de exclusão de Pauli, que

impede a sobreposição das nuvens eletrônicas. A sua contribuição seminal foi propor uma forma funcional simples que combinasse esses dois efeitos antagônicos de maneira eficaz.

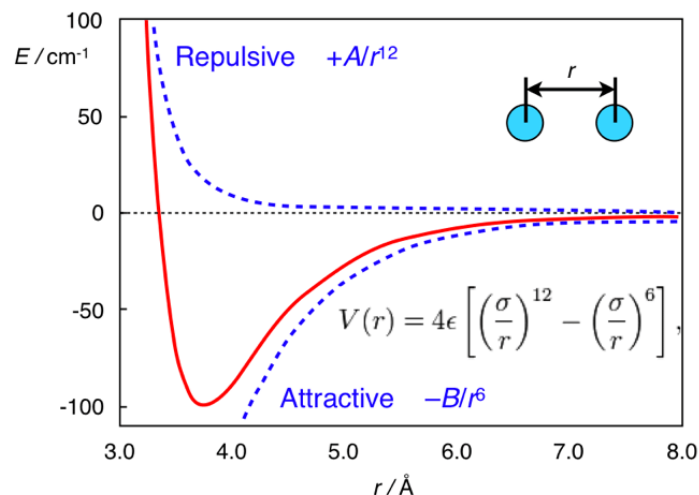
FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O Potencial de Lennard-Jones (12-6) é definido pela seguinte equação (LENNARD-JONES, 1924):

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6],$$

em que $V_{LJ}(r)$ é a energia potencial de interação entre duas partículas; r é a distância entre os centros das duas partículas; ϵ é a profundidade do poço de potencial e σ é a distância na qual a energia potencial é zero. A figura mostra uma representação do potencial de Lennard-Jones (12,6), destacando as partes repulsiva e atrativa.

FIGURA 1: Potencial de Lennard-Jones (12-6)



FONTE: Extraído de Gavrielides (2017, p. 36).

A escolha dos expoentes 12 e 6 não é arbitrária e possui fundamentos físicos e práticos:

a) O termo atrativo ($-1/r^6$). Este termo representa a componente atrativa de longo alcance do potencial. A sua origem física está nas forças de van der Waals, mais especificamente nas forças de dispersão de London. Estas são forças fracas e instantâneas que surgem devido a flutuações correlacionadas nas distribuições de carga de átomos ou moléculas apolares. Um cálculo baseado na eletrodinâmica quântica mostra que a interação de dipolo flutuante-dipolo induzido decai com a distância $-1/r^6$, justificando matematicamente a escolha do expoente 6 (ISRAELACHVILI, 2011).

b) O termo repulsivo ($1/r^{12}$). Este termo representa a componente repulsiva de curto alcance. A repulsão ocorre quando as nuvens eletrônicas dos dois átomos começam a se sobrepor, violando o Princípio de Exclusão de Pauli. Do ponto de vista teórico, espera-se que a repulsão tenha um decaimento exponencial. No entanto, Lennard-Jones

optou pela forma $1/r^{12}$. Isso simplifica enormemente os cálculos, pois o termo repulsivo pode ser visto simplesmente como o quadrado do termo atrativo (CURTISS et al., 1954). Apesar de ser uma aproximação, ela se mostrou notavelmente eficaz para muitos fins.

A força $F(r)$ associada ao potencial é obtida tomando o gradiente negativo do potencial. Para uma interação unidimensional, ao longo da linha que conecta as duas partículas, a força é dada por

$$F(r) = - \frac{dV_{LJ}(r)}{dr} \Rightarrow F(r) = 24\epsilon \left[2 \frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - \frac{\sigma^6}{r^7} \right].$$

Análise da Força:

- 1) Para $r < r_0$ (r_0 é a distância de equilíbrio, definida abaixo), o sinal da força $F(r)$ é positivo, indicando repulsão entre as partículas.
- 2) Para $r > r_0$, o sinal da força $F(r)$ é negativo, indicando atração entre as partículas.
- 3) Para $r = r_0$, a força $F(r)$ é nula, indicando uma posição de equilíbrio estável.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ao analisar a função $V_{LJ}(r)$ podemos derivar suas propriedades mais importantes (LENNARD-JONES, 1924; CURTISS et al., 1954), que definem os parâmetros fundamentais do modelo.

- a) Distância de Energia Zero (σ) é a distância na qual o potencial é zero, ou seja,

$$V_{LJ}(r = \sigma) = 0.$$

- b) Distância de Equilíbrio (r_0) é a distância na qual o potencial atinge seu mínimo, ou seja, onde a força é zero e a ligação é mais estável. Encontramos r_0 derivando o potencial e igualando a zero. Assim,

$$\frac{dV_{LJ}(r)}{dr} = 0, \text{ logo } r_0 = 2^{\frac{1}{6}} \sigma \approx 1.122\sigma.$$

- c) Energia de Dissociação ($-\epsilon$) é a profundidade do poço de potencial, ou seja, a energia mínima. É a energia necessária para separar completamente o par de átomos a partir da posição de equilíbrio. Calculamos a energia de dissociação substituindo r_0 na equação do potencial. Portanto, $V_{LJ}(r_0) = -\epsilon$.

- d) Aplicações e Interpretação Física

O potencial de Lennard-Jones é uma ferramenta versátil com aplicações que vão muito além da sua concepção original para gases nobres (RAPAPORT, 2004).

- Simulação de Fluidos Simples: É o potencial mais utilizado em simulações de Dinâmica Molecular (MD) e Monte Carlo (MC) para modelar argônio, criptônio, xenônio e outros fluidos simples. Ajustando os parâmetros ϵ e σ , é possível reproduzir propriedades termodinâmicas como a pressão de vapor, calor de vaporização e densidade do líquido em equilíbrio.

- Modelagem de Colóides e Polímeros: Em sistemas de "partículas macias", o potencial de LJ é frequentemente usado para representar a interação efetiva entre macromoléculas ou agregados coloidais.
- Física de Superfícies e Adsorção: É usado para calcular potenciais de adsorção de átomos em superfícies cristalinas.
- Ponto de Partida para Potenciais Mais Realistas: Para sistemas mais complexos, como água ou metais, o potencial de LJ serve como uma base sobre a qual termos adicionais (como cargas pontuais para a água ou dependência angular para metais) são adicionados.

A interpretação física do potencial é direta: a longas distâncias, os átomos não interagem ($V \approx 0$). Conforme se aproximam, a atração de van der Waals domina, fazendo com que a energia potencial diminua, "puxando" os átomos um contra o outro. Esta atração atinge um máximo na distância de equilíbrio r_0 , formando uma ligação fraca. Se os átomos continuam a se aproximar para $r < r_0$, a repulsão extremamente forte domina, fazendo com que a energia potencial cresça rapidamente, impedindo o colapso dos átomos (ISRAELACHVILI, 2011).

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O Potencial de Lennard-Jones demonstra ser um modelo eficaz para descrever interações entre partículas neutras, equilibrando precisão e simplicidade computacional. Sua formulação combina adequadamente os efeitos de repulsão de curto alcance e atração de longo alcance, permitindo a previsão de propriedades macroscópicas a partir de interações microscópicas. Embora apresente limitações, como a incapacidade de modelar interações direcionais complexas, sua utilidade permanece sólida como base para simulações em física e química de materiais, e como ferramenta fundamental para o ensino de forças intermoleculares.

REFERÊNCIAS

- CURTISS, Charles Francis; BIRD, Robert Byron. Molecular theory of gases and liquids. J. Wiley, 1954.
- LENNARD-JONES, John Edward. On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of gas. Proc. Roy. Soc. A, v. 106, p. 463-477, 1924.
- LENNARD-JONES, John E. Cohesion. Proceedings of the Physical Society, v. 43, n. 5, p. 461, 1931.
- GAVRIELIDES, Andreas. Modelling the DGEBA-EDA poly-epoxy and its reactivity towards copper: experimental and numerical approach. 2017. Tese (Doutorado em Ciência e Engenharia de Materiais) — Université Toulouse 3 Paul Sabatier, Toulouse, 2017.
- ISRAELACHVILI, Jacob N. Intermolecular and surface forces. Academic press, 2011.
- RAPAPORT, Dennis C. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge university press, 2004.