



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Interação de Partículas sob o Potencial de Lennard-Jones
Autor	JULIANA HARMATIUK DE OLIVEIRA
Orientador	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

Interação de partículas sob o potencial de Lennard-Jones

Bolsista: Juliana Harmatiuk de Oliveira
Orientadora: Márcia Cristina Bernardes Barbosa
Grupo de Fluidos Complexos, Instituto de Física, UFRGS

Neste trabalho foi feita a simulação de um gás ideal, constituído de partículas eletricamente neutras, utilizando-se da interação descrita pelo potencial de Lennard-Jones. A interação sob esse potencial se reduz a um problema clássico de interação entre N corpos, portanto não serão levados em conta efeitos quânticos entre os constituintes do gás. O projeto tem como objetivo ser uma introdução ao estudo de dinâmica molecular, com o intuito de que mais adiante possa-se adicionar complexidade ao sistema simulado a partir da utilização modelos teóricos mais elaborados.

O potencial de Lennard-Jones é um modelo de interação simples e computacionalmente leve, dado por:

$$V_{LJ} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Onde o termo à sexta potência é um termo atrativo de longo alcance, que modela a interação dipolo-dipolo devida à dispersão eletrônica das partículas. O termo à décima segunda potência é o termo repulsivo, e uma simplificação do modelo de repulsão de Pauli. Apesar de sua simplicidade, o potencial de Lennard-Jones é uma ótima aproximação para a interação entre partículas de um gás ideal; juntamente com a vantagem de sua implementação simples, se torna o modelo ideal para os propósitos desse trabalho.

O sistema simulado consiste de uma caixa cúbica, com dimensões a serem definidas pelo usuário, contendo N partículas de gás ideal, à temperatura constante. Para a realização da simulação foi preparada a amostra de gás sobre a qual foram feitas as medidas do sistema, através dos seguintes passos:

1. Alocação das partículas de gás na caixa;
2. Computação das forças de interação entre todas as partículas;

3. Resolução das equações de movimento para cada uma delas;
4. Cálculo da temperatura e velocidade do centro de massa instantâneos do sistema.

Para manter a simulação simples, partiu-se do pressuposto de não interação entre as partículas e as fronteiras da caixa. Portanto, foram implementadas condições de contorno periódicas para que, ao atravessar por uma fronteira, não houvesse colisão entre a partícula e a caixa e sim uma realocação da partícula para a fronteira oposta, de modo a conservar seu momentum.

A integração das equações de movimento foi feita utilizando-se o algoritmo Verlet, considerado adequado para esse sistema pelo fato de apresentar pouca dissipação de energia a longo prazo, além de não requerer muita memória e ser de simples implementação. Além disso a simulação utiliza passos pequenos de iteração no tempo, regime sob qual o algoritmo Verlet apresenta uma maior precisão na determinação das trajetórias das partículas.

Como o sistema simulado não está submetido a nenhuma força externa, apenas ao potencial de interação, o comportamento esperado é que a temperatura se mantenha constante, juntamente com o centro de massa do sistema. Porém, como a temperatura é calculada através da média das energias cinéticas de cada partícula, observa-se uma flutuação nesse valor, e portanto se faz necessário o uso de um termostato, que, em dinâmica molecular, é um algoritmo utilizado para equilibrar a temperatura do sistema. Para tal, foi escolhido o termostato de Berendsen, que suprime as flutuações na energia cinética do sistema, simulando um "banho térmico" sobre a amostra. Por sua simplicidade, o termostato de Berendsen introduz um erro no cálculo das trajetórias das partículas do gás, porém é adequado ao escopo do trabalho.