

Modelo de uma mistura usando o método de Dinâmica Molecular



M. Sousa
Departamento de Física
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Introdução

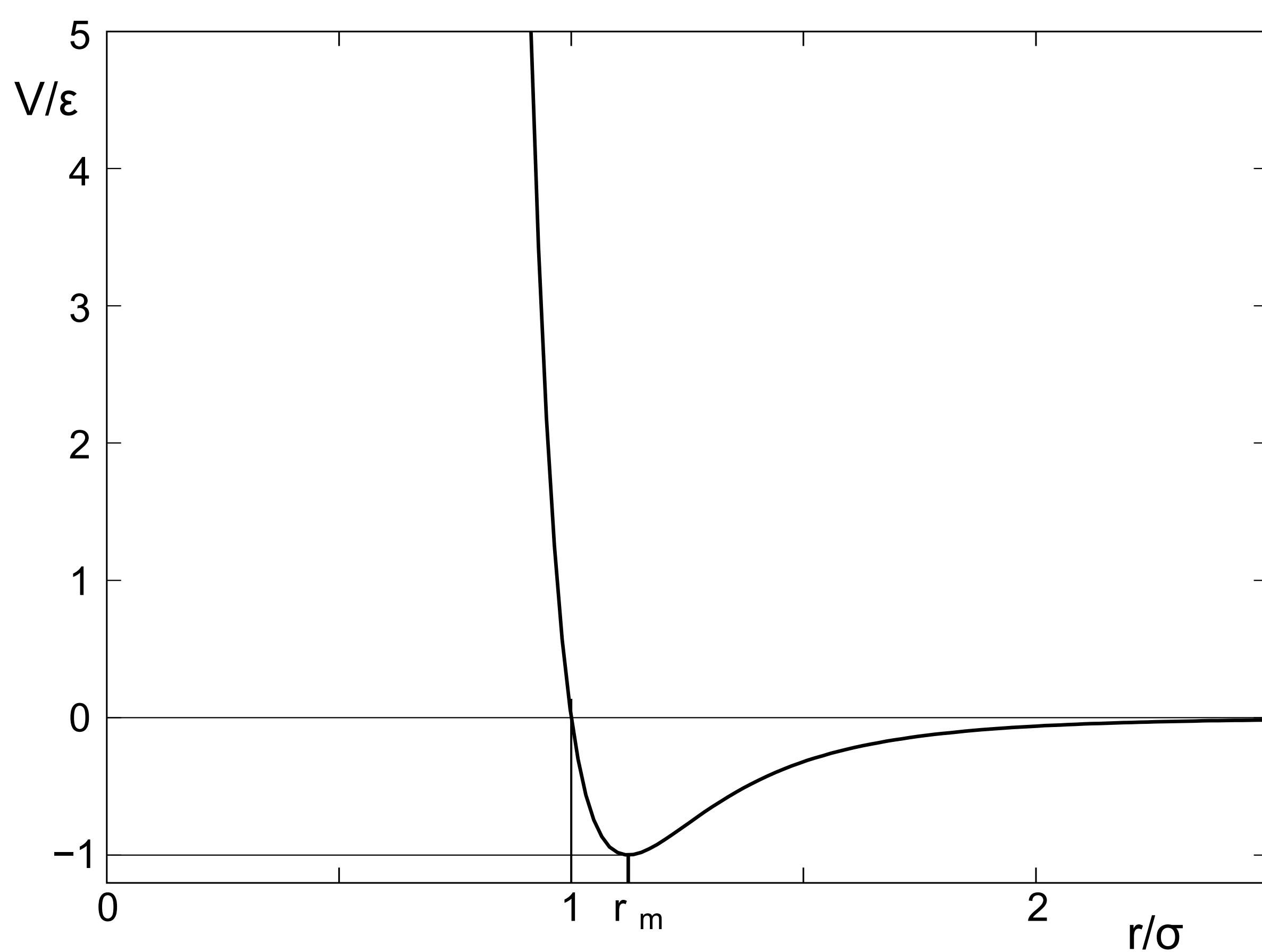
Nosso objeto de estudo para esse trabalho foi uma mistura de duas diferentes partículas que interagem entre si por um potencial contínuo. O foco do trabalho é representar um modelo teórico e comparar resultados com este.

O potencial

O potencial utilizado no trabalho é o potencial de Lennard-Jones que é dado pela seguinte expressão:

$$V = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\}$$

- O termo elevado as 12^a potência é o termo que simula repulsão por forças de Van der Waals enquanto o termo elevado a 6^a potência é o termo que simula atração por forças de Van der Waals.



A simulação

O sistema foi iniciado numa rede cristalina cúbica, as equações de movimento foram calculadas pelo algoritmo Velocity-Verlet¹ e o termostato de Berendsen² foi utilizado para simular um banho térmico na caixa para deixar a temperatura constante. As expressões se encontram abaixo, respectivamente, para as equações de movimento usadas no Velocity Verlet e para o fator de escala da temperatura do termostato de Berendsen:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t^2 \mathbf{a}(t)}{2}$$

$$\mathbf{a}(t + \Delta t) = \frac{\mathbf{f}(t + \Delta t)}{m}$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t [\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \Delta t)]$$

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{\Delta t}{\tau_T} \cdot \left(\frac{T_0}{T_{Sys}} - 1 \right)}$$

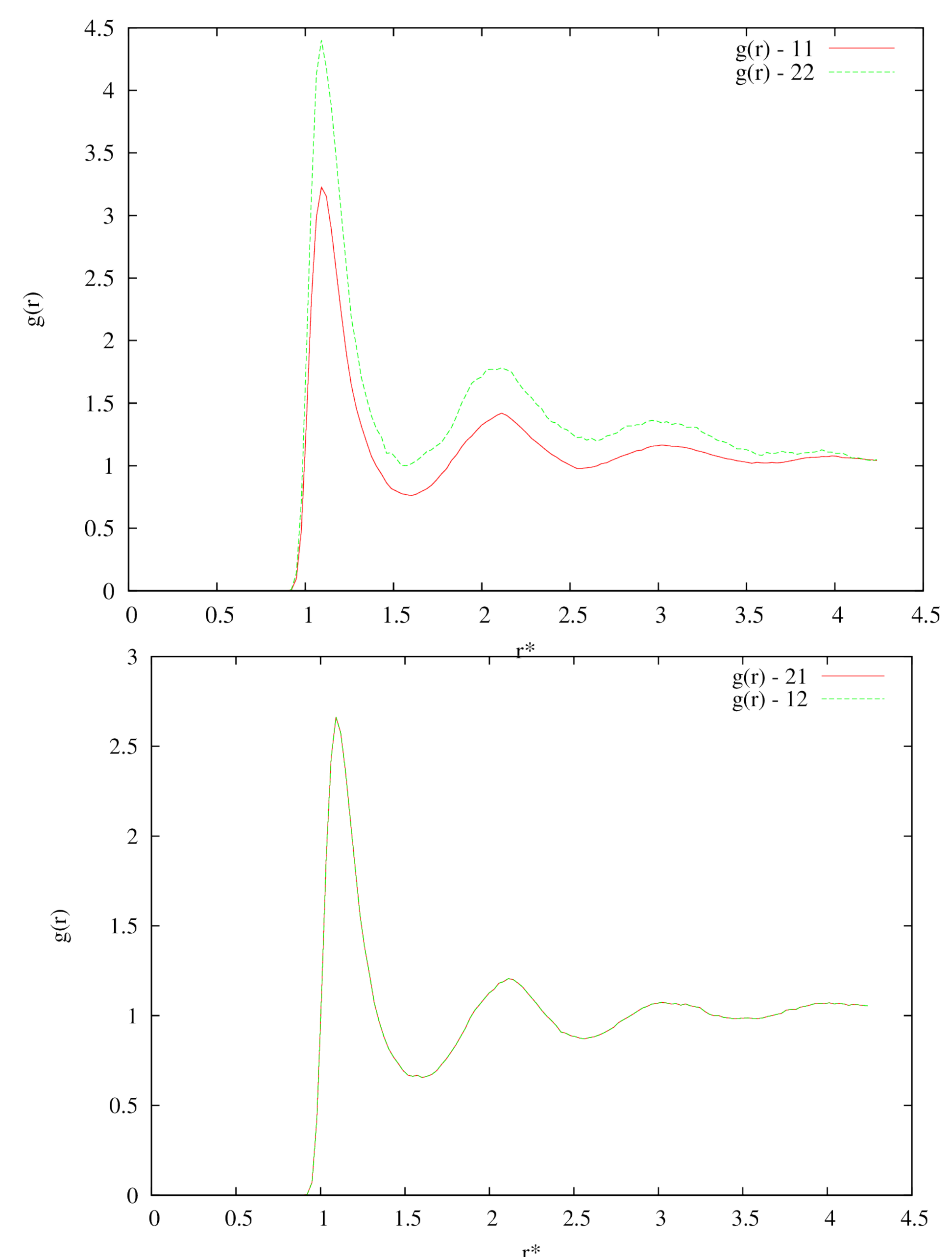
A simulação foi feita com duas partículas de raios diferentes e carga uniforme, e devido ao potencial usado não tem-se efeitos de colisão. A simulação foi primeiramente passada com um dt de 0.001 com um total de 100000 timesteps.

O sistema foi então equilibrado num estado microcanônico primeiramente durante os primeiros 10000 timesteps.

Variamos então a densidade e a temperatura do sistema e observamos tanto a distribuição radial quanto o diagrama de fases dessa mistura.

Resultados

Para uma densidade de 0.75 e uma temperatura de 1.0, podemos ver que a mistura se encontra no estado líquido pela distribuição radial abaixo:



Reconhecimento

Esse trabalho foi suportado pelo CNPq e FAPERGS, Brasil.

Referências

¹D.Frenkel & B.Smit: "Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications".

²H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. Van Gunsteren, A. DiNola, and J.R. Haak, "Molecular dynamics with coupling to an external bath"

³Lennard-Jones, J. E. (1924), "On the Determination of Molecular Fields".