

Isócoras do modelo de Lennard Jones para descrição de fluidos simples



Pedro Henrique Cezar Remião de Macedo¹
Orientadora: Prof. Marcia Barbosa¹
¹Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Física



Resumo

Estudamos o comportamento das linhas de densidade constante para diferentes temperaturas de um fluido representado por um potencial de Lennard-Jones. O referido potencial é interessante para tratar fluidos simples e a completa compreensão do seu diagrama de fases é importante para misturas entre eles.

Neste trabalho analisamos o comportamento da pressão versus temperatura de diversas isócoras obtidas para este modelo via Dinâmica Molecular. Como este é um modelo muito simples, ele serve como aprendizado de saber lidar com a dinâmica do sistema.

Simulação

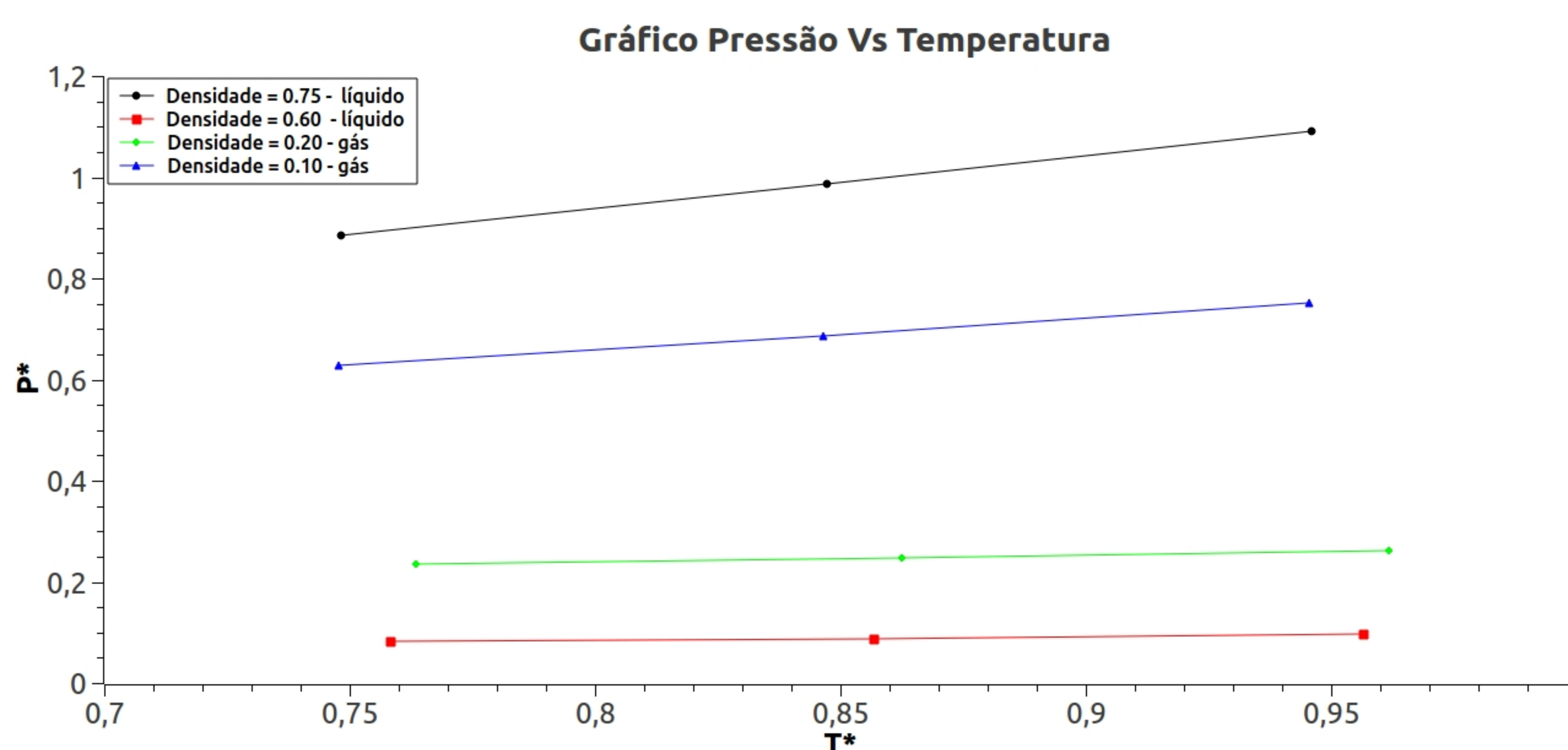


Figura 1 : Diagrama PV(Pressão Vs Temperatura) para densidades em estados diferentes.

O Diagrama PV acima decorre de simulações em dinâmica molecular NVE, regido pelo potencial Lennard-Jones, com uso de um termostato Berendsen. Neste foram traçadas as linhas de densidade constante, com seus respectivos valores de pressão e temperatura, utilizando-se de duas densidades em que o sistema está na fase líquida e duas na gasosa.

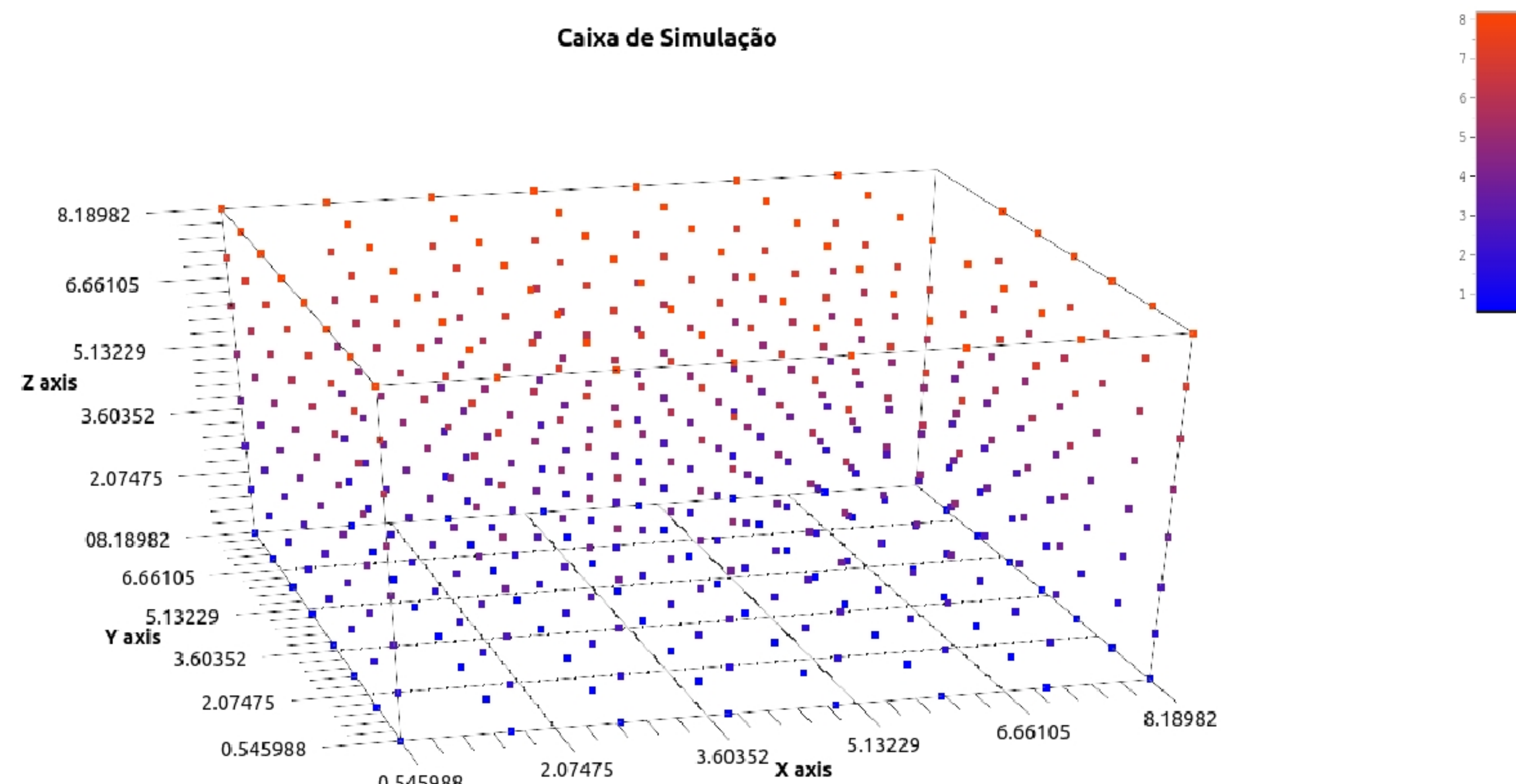


Figura 2 : Caixa de Simulação com 500 partículas utilizando-se do potencial Lennard-Jones.