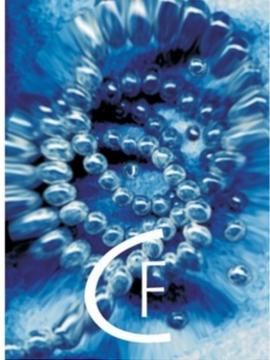


# Modelo de uma mistura usando o método de Dinâmica Molecular



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

## Introdução

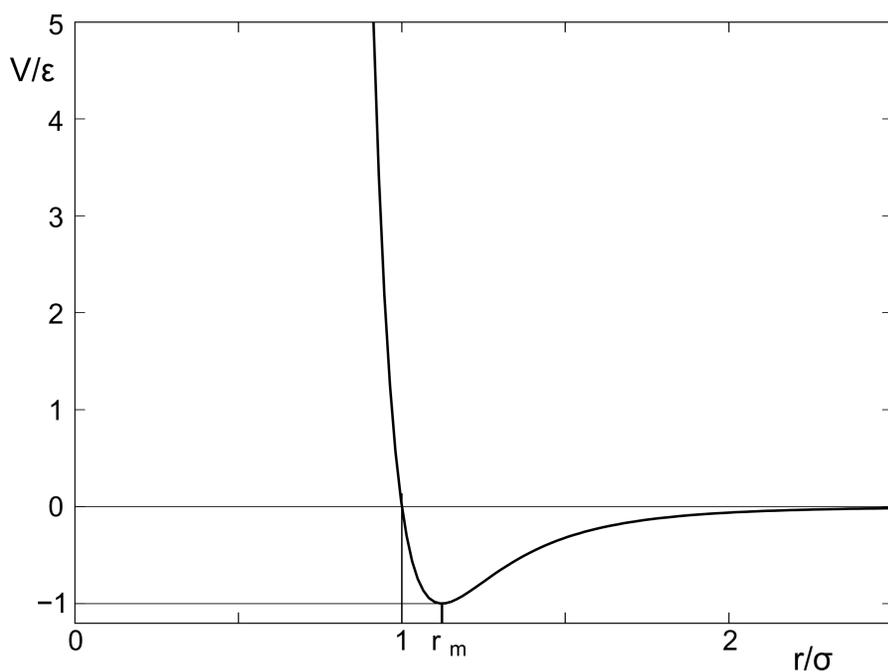
Nosso objeto de estudo para esse trabalho foi uma mistura de duas diferentes partículas que interagem entre si por um potencial contínuo. O foco do trabalho é representar um modelo teórico e comparar resultados com este.

## 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<sup>a</sup> potência é o termo que simula repulsão por forças de Van der Waals enquanto o termo elevado a 6<sup>a</sup> 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-Verlet<sup>1</sup> e o termostato de Berendsen<sup>2</sup> 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:

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

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

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

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

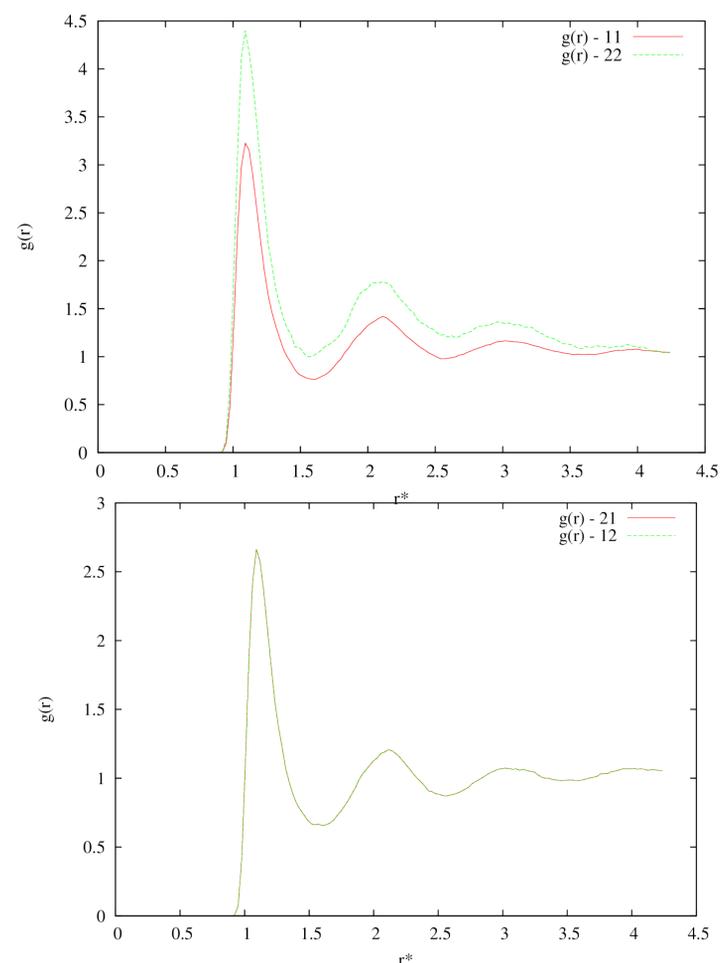
A simulação foi feita com duas partículas de raios diferentes e carga uniforme, e devido ao potencial usado não tem-se efeitos de colisão. A simulação foi primeiramente passada com um dt de 0.001 com um total de 100000 timesteps.

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

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

<sup>2</sup>H.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"

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