

Transição de Fase de um potencial de duas escalas – Dinâmica Molecular



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

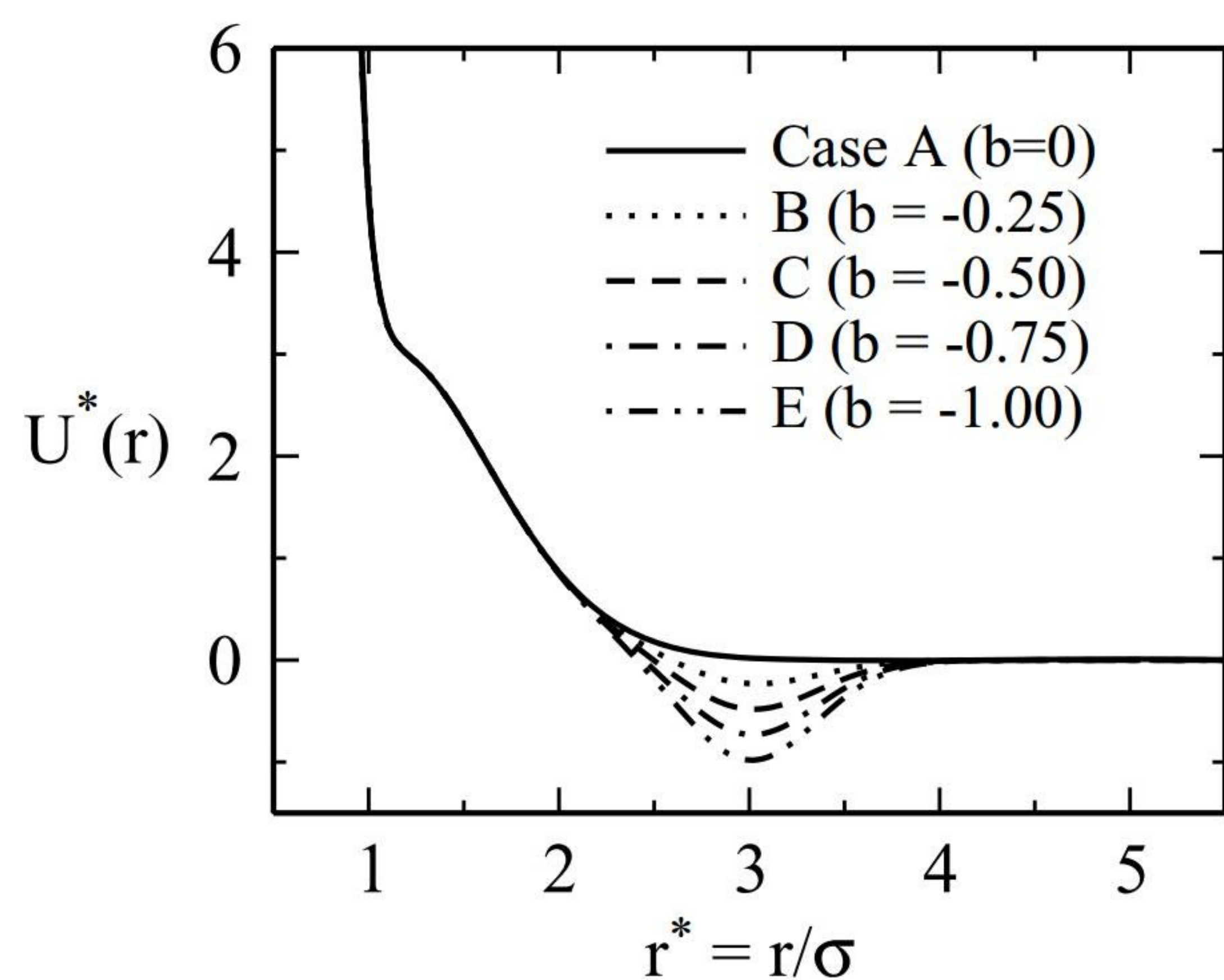
Introdução

O objetivo do trabalho é representar o diagrama de fase (P^* vs T^*) num fluido usando o potencial de Lennard-Jones mais duas gaussianas num ensemble canônico (NVT).

O potencial

O potencial utilizado no trabalho é o potencial de Lennard-Jones mais duas Gaussianas, e é dado pela seguinte expressão:

$$U^*(r) = 4 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + a \exp \left[-\frac{1}{c^2} \left(\frac{r - r_0}{\sigma} \right)^2 \right] + b \exp \left[-\frac{1}{d^2} \left(\frac{r - r_1}{\sigma} \right)^2 \right]$$



Detalhes da Simulação

- Algoritmo Velocity-Verlet para integração numérica
- Termostato de Berendsen
- Equação do Virial usada para o cálculo da Pressão
- Timestep utilizado 0.001

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

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

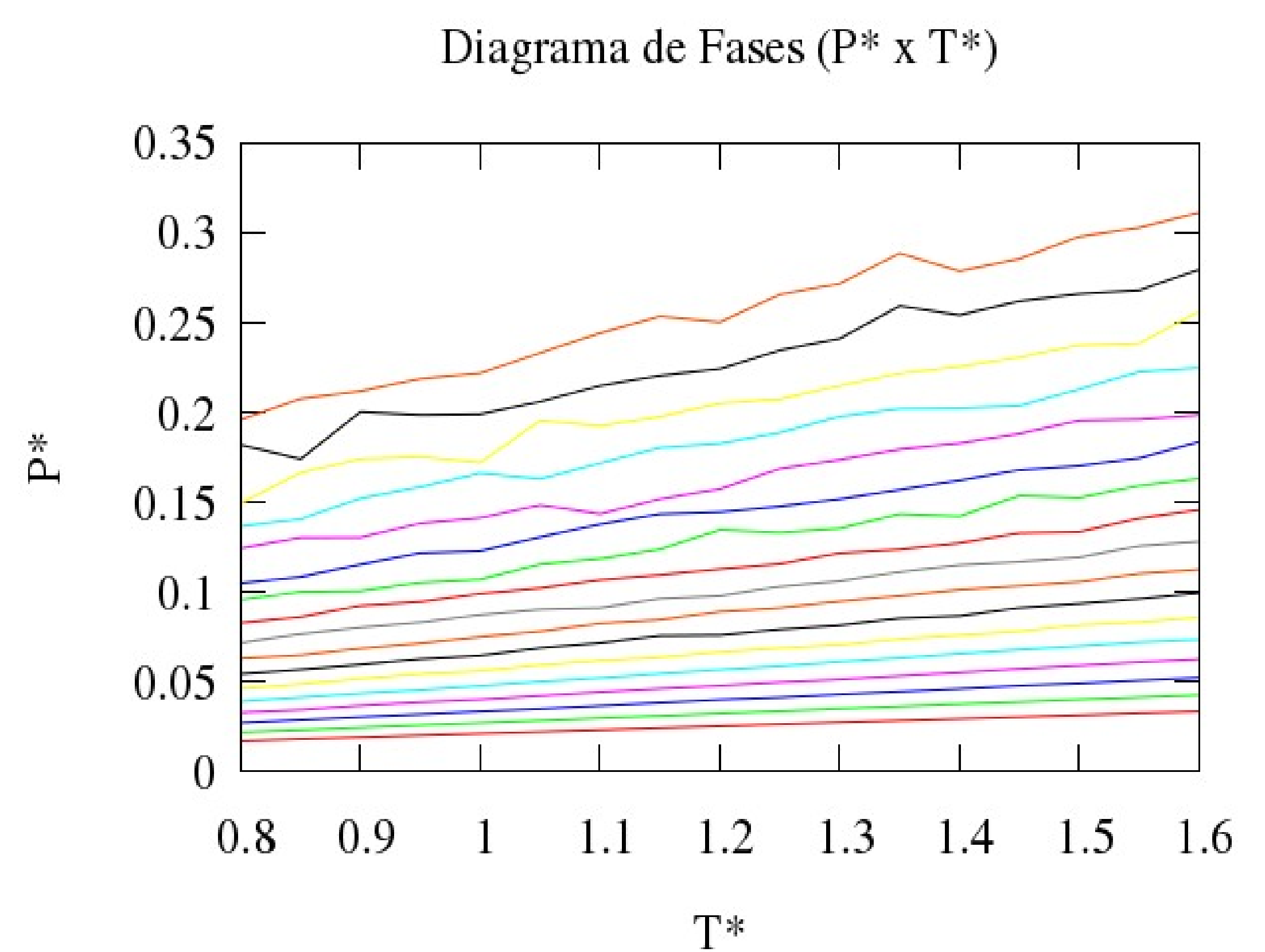
$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t [\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \Delta t)]$$

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

$$P = \frac{Nk_B T}{V} + \frac{\sum_i^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{f}_i}{dV}$$

Resultados

Foram obtidos dados de pressão a densidade constante, porém variando-se a temperatura do sistema, montando então o seguinte gráfico da pressão pela temperatura em escalas reduzidas:



As curvas do gráfico estão dispostas de baixo para cima de acordo com as densidades simuladas. Sendo a mais de baixo relativa à densidade 0.02 e a mais acima relativa à densidade igual à 0.095.

Esse trabalho foi apoiado pelo CNPq e FAPERGS, Brasil.

Referências

- D.Frenkel & B.Smit: "Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications".
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"
Lennard-Jones, J. E. (1924), "On the Determination of Molecular Fields"

Nunes Jonathas, Salcedo Evy, Barros De O. Alan, Barbosa C. Marcia "Effects of the attractive interactions in the thermodynamic, dynamic and structural anomalies of a two length scale potential".