



UNIVERSIDAD
DE EL SALVADOR



Dinamica Molecular: Gas Diluido

Fisica Computacional

Marvin Hernández¹

¹Universidad de El Salvador

Facultad de Ciencias Naturales y Matemática December 14, 2023

Enfoque Clásico



La Dinamica molecular es un metodo general de modelado de sistemas de multiples particulas con escalas microscopicas. Aplicable a sistemas en diferentes estados de la materia.

Consiste en simular la dinamica de estos cuerpos con las leyes de movimiento que gobiernan a estas escalas.

Se descarta un enfoque cuantico, pues computacionalmente es mucho menos optimo que los calculos clasicos y el la longitud de onda de deBroglie planteado para estos tipos de sistemas es despreciable, por lo que no se pierde exactitud al hacer aproximaciones clasicas.

Por lo tanto para determinar las posiciones de estas particulas se opta por aplicar la segunda ley de Newton.

Para particulas como las de un gas encerradas en un caja de n -dimensiones su camino libre medio aumenta a la potencia de $n-1$. Lo que nos indica que computacionalmente, es más sencillo simular un gas en una caja de 2 dimensiones y no de 3. Por lo que se trabajara en una simulación de un gas en una caja 2D.

Metodo de Verlet



El estado mecanico de las particulas esta determinado por su posición y velocidad, además por la segunda ley de Newton es necesario determinar su aceleración.

Este es un problema con condiciones iniciales, y para hacer estas aproximaciones se hace uso del metodo de Verlet, el cual para un lapso de tiempo Δt consiste en:

$$x_i(t + \Delta t) \approx 2x_i(t) - x_i(t - \Delta t) + a_i(t)(\Delta t)^2$$
$$v_i(t) \approx \frac{x_i(t + \Delta t) - x_i(t - \Delta t)}{2\Delta t}, \quad \frac{d^2}{dt^2}x_i = a_i$$

Potencial de Lennard-Jones



Para gases como el Argón las interacciones intermoleculares se dan por fuerzas de Van Der Waals, que consisten principalmente en una fuerza de atracción debido a los momentos dipolares electricos transitorios de los atomos, y una fuerza de repulsión debido al solapamiento de nubes electronicas.

$$V(r) = 2\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right), \quad \mathbf{F} = -\nabla V$$

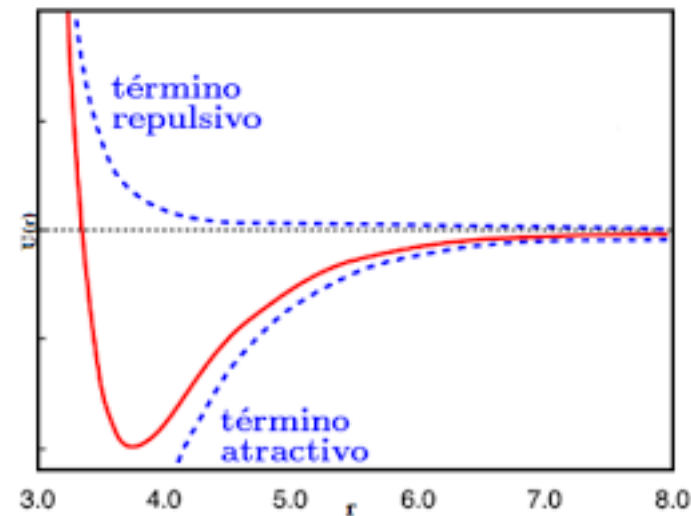


Figure: Potencial Lennard- Jones

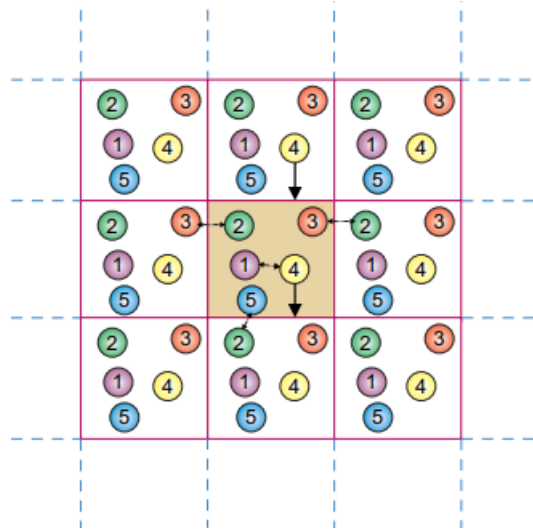
Condiciones de Contorno



Por conveniencia de calculos, en este tipo de simulaciones no se hace uso de una gran cantidad de particulas. Por lo que en fronteras rigidas la mayoria de colisiones serian con las paredes y no intermoleculares, lo cual es opuesto a lo esperado en la realidad

Para una caja cuadrada 2-D, se deben imponer condiciones de contorno que hagan que las particulas se encuentren confinadas entre las paredes, pero sin que estas paredes perturben el sistema.

Por lo tanto se opta por condiciones de frontera de una celda periodica. Esto impone que la interacción entre particulas sea como si existisiesen cajas identicas alrededor de nuestra caja real.



Programación: Condiciones Iniciales



Debido al potencial en cuestión, las posiciones iniciales de las partículas no pueden ser completamente aleatorias, ya que no el potencial LJ debe impedir que las partículas estén a una distancia menor o igual a σ . Por lo tanto se opta por colocar las posiciones de las partículas formando una red uniforme. Y luego se suma un desplazamiento aleatorio que impida que la distancia entre partículas sea igual a *sigma*.

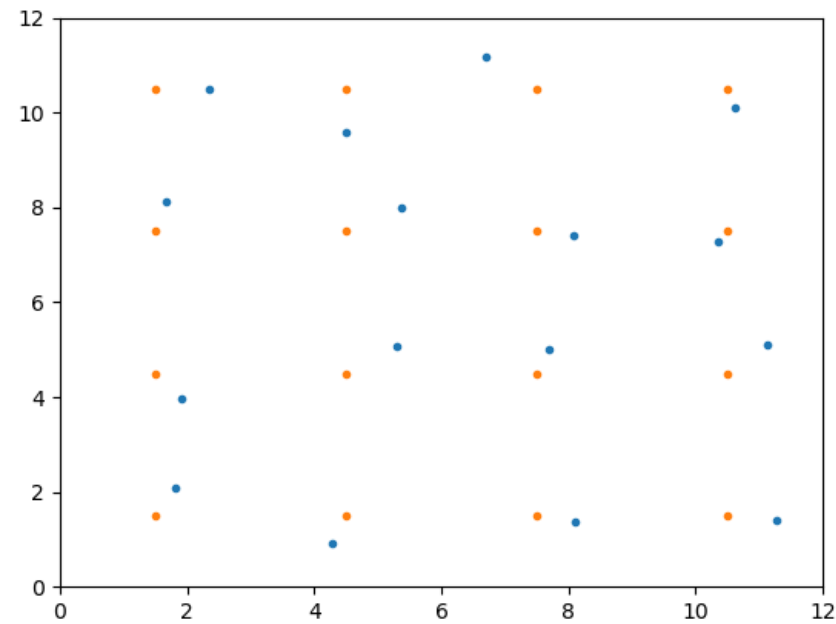


Figure: Posiciones iniciales, en naranja estructura de red uniforme, en azul posiciones iniciales para la simulación

Programación: Condiciones de contorno, y evolución temporal



Para que simular el paso del tiempo se debe optar por un intervalo de tiempo optimo, pues de este depende en gran parte la fuerza con la que interactuan las particulas.

Con respecto a las condiciones de frontera, estos afectan a 2 calculos, la posición y la distancia entre particulas. Debido a las condiciones periodicas de contorno, cuando una particula llega a una pared esta debe teletransportarse al borde opuesto de la caja. Mientras que las distancias entre 2 particulas no puede ser siempre la convencional, pues en el caso de 2 particulas cerca de paredes opuestas su distancia convencional es grande pero por las condiciones impuestas su interacción debe ser como si estuvieran muy cerca.

Por consideraciones de velocidad de calculo, tambien es aconsejable limitar el algoritmo a que calcule las fuerzas debido solo a particulas a una distancia maxima.

Simulación

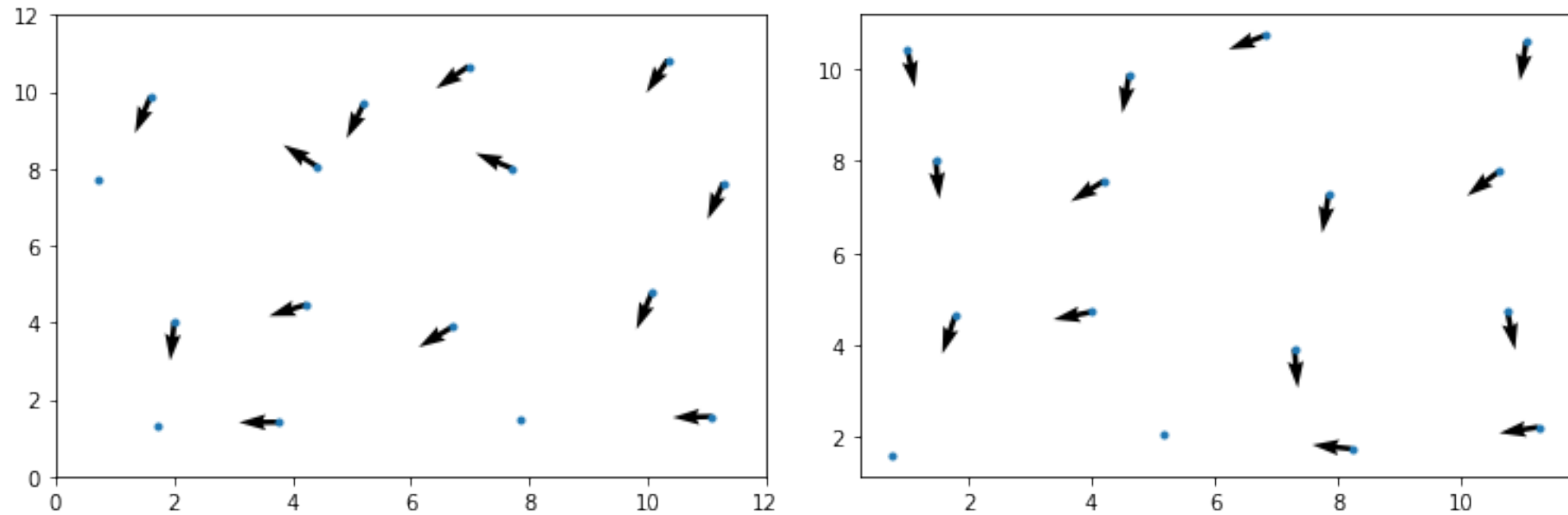


Figure: Aceleraciones y posiciones iniciales para diferentes simulaciones

Simulación

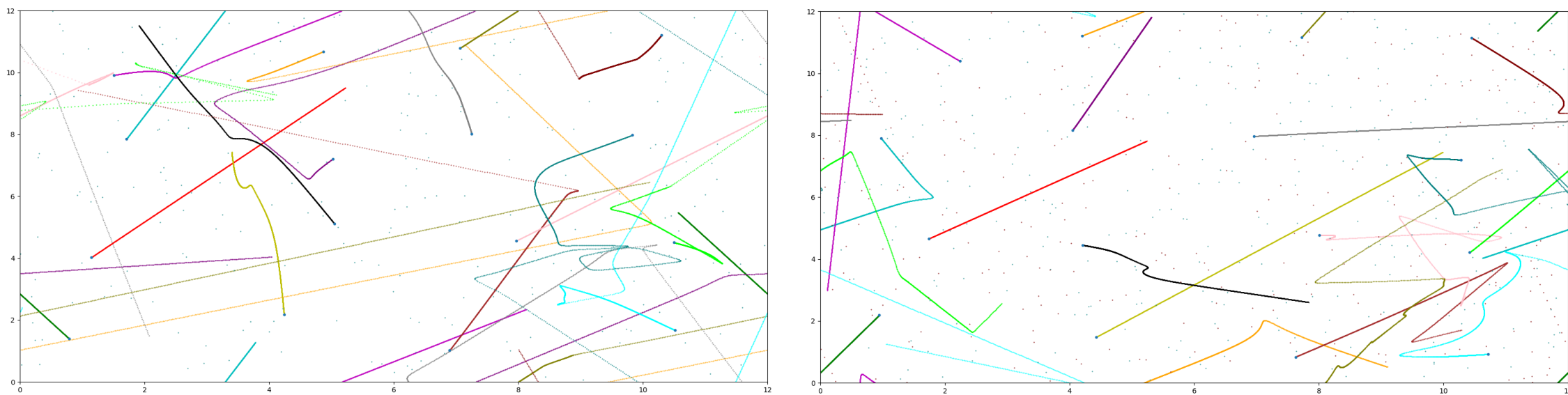


Figure: Trayectorias de 2 simulaciones

References



- [1] N. Giordano and H. Nakanishi, “*Computational Physics*”, Capitulo 9, Addison-Weley, 2005.
- [2] Andrew R. McCluskey y otros. “*The interaction between simulation and scattering*”. Recuperado de: [https://pythoninchemistry.org/sim_and_scat/intro.\(s.f\)](https://pythoninchemistry.org/sim_and_scat/intro.(s.f)).
- [3] R. Landau and M. Páez, “*Computational Physics*”, cap. 18, CRC Press, 2018.