Simulación en física de materiales

Daniel Vazquez Lago

24 de octubre de 2024

Índice

1. Objetivos

El objetivo de este primer optativo es estudiar si realmente, tras los 5×10^5 pasos, hemos llegado a una configuración de equilibrio. Para esto presentaremos 3 diferentes condiciones que un sistema aislado en equilibrio debería satisfacer ([1]):

- La energía E total debe mantenerse constante en el tiempo.
- Los valores medios de las velocidades (cada una de las componentes) deben seguir distribuciones de Maxwell.
- La función H de Boltzmann debe tender a un valor constante.

Existen mas condiciones, aunque en realidad ninguna de estas (individualmente y colectivamente) nos aseguren la existencia del equlibrio.

2. Organización

3. Equilibración

3.1. Equilibración de las energías

3.2. Distribución de Velocidades

3.2.1. Teoría

En este apartado vamos a seguir el desarrollo hecho en el [1] (pag. 65-66, pag. 120). Para una distribución de velocidades en el equilibrio (colectividad NVT) verifica que, para cada una de las componentes i de las velocidades (v_x, v_y, v_z), dado que son independientes:

$$f(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv_i}{2kT}\right) \tag{1}$$

Aunque la distribución de Maxwell halla sido derivada en el formalismo de la colectividad canónica (NVT, PVT...), la distribuciones de cualquier sistema en el equilibrio debería ser de este tipo, ya que en el límite termodinámico las propiedades en las diferentes colectividades se vuelven equivalentes.

Una de las consecuencias de la distribución de velocidades es la equipartición de la energía, por lo las componentes cartesianas de la velocidades moleculares deberían tener un valor medio igual al de la temperatura del sistema:

$$\frac{1}{N}\left\langle \sum_i v_{ix}^2 \right\rangle = \frac{1}{N}\left\langle \sum_i v_{ix}^2 \right\rangle = \frac{1}{N}\left\langle \sum_i v_{ix}^2 \right\rangle = T \tag{2}$$

3.3. Distribución H-Boltzmann

En este apartado vamos a seguir el desarrollo hecho en el [1] (pag. 66-67, pag. 120-121). Definimos la función H de Boltzmann (función H) en un instante t como:

$$H_i(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(v_i)\ln(f(v_i))\mathrm{d}v_i \quad i = x, y, z \tag{3}$$

de tal modo que podemos definir la H de Boltzmann como

$$H = \frac{1}{3}\left(H_x + H_y + H_z\right) \tag{4}$$

El **teorema H de Boltzmann** asegura que una distribución llega al equilibrio cuando se alcanza un mínimo en la función H de Boltzmann, dada por la anterior ecuación

4. Conclusiones

Referencias

[1] J. M. Haile. *Molecular Dynamics Simulation*.