Caso de Wyl (Modelo Tipo FRAC, DGS)

Resultados del modelo de potencial DGS obtenidos con Dinámica Browniana, para comparar.

3.1. Reducción de variables

Es posible definir la posición, energía y temperatura reducidas de la siguiente manera, tomando como longitud característica el diámetro σ de las partículas y como energía característica la energía térmica β:

$$r^* \equiv \frac{r}{\sigma} \tag{2}$$

$$u^*(r) \equiv \frac{u(r)}{k_B T} = \beta u(r) \tag{3}$$

$$T^* \equiv \frac{k_B T}{\varepsilon} = \frac{1}{\beta\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon^*} \tag{4}$$

Con ellas, se redujo la ecuación 1 como sigue. Primeramente, se multiplicó por β y se redujeron los exponentes que ya incluyen a σ.

$$\beta u(r) = \beta\epsilon e^{-(r^*)^2} - \beta\eta e^{(r^*-\xi^*)^2} \tag{5}$$

$$u(r^*)^* = \frac{1}{T^*} e^{-(r^*)^2} - \frac{\eta}{T^*\epsilon} e^{(r^*-\xi^*)^2} \tag{6}$$

Definimos la reducción del parámetro de intensidad atractiva como

$$\eta^* \equiv \frac{\tilde{\eta}}{T^*} \tag{7}$$

$$\tilde{\eta} \equiv \frac{\eta}{\epsilon} \tag{8}$$

Así la ecuación (6) queda de la forma

$$u(r^*)^* = \frac{1}{T^*} e^{-(r^*)^2} - \eta^* e^{(r^*-\xi^*)^2} \tag{9}$$

3.3. Propiedades Estructurales

Haciendo uso de el código de simulación con Dinámica Browniana se calculó la función de distribución radial $g(r)$ del sistema para la isoterma supercrítica $T^* = 0.2$ y los parámetros $\eta^* = 0.1315$ y $\xi^* = 3.0$ utilizando diferentes concentraciones reducidas n^* en el intervalo $[0.2, 2.0]$.

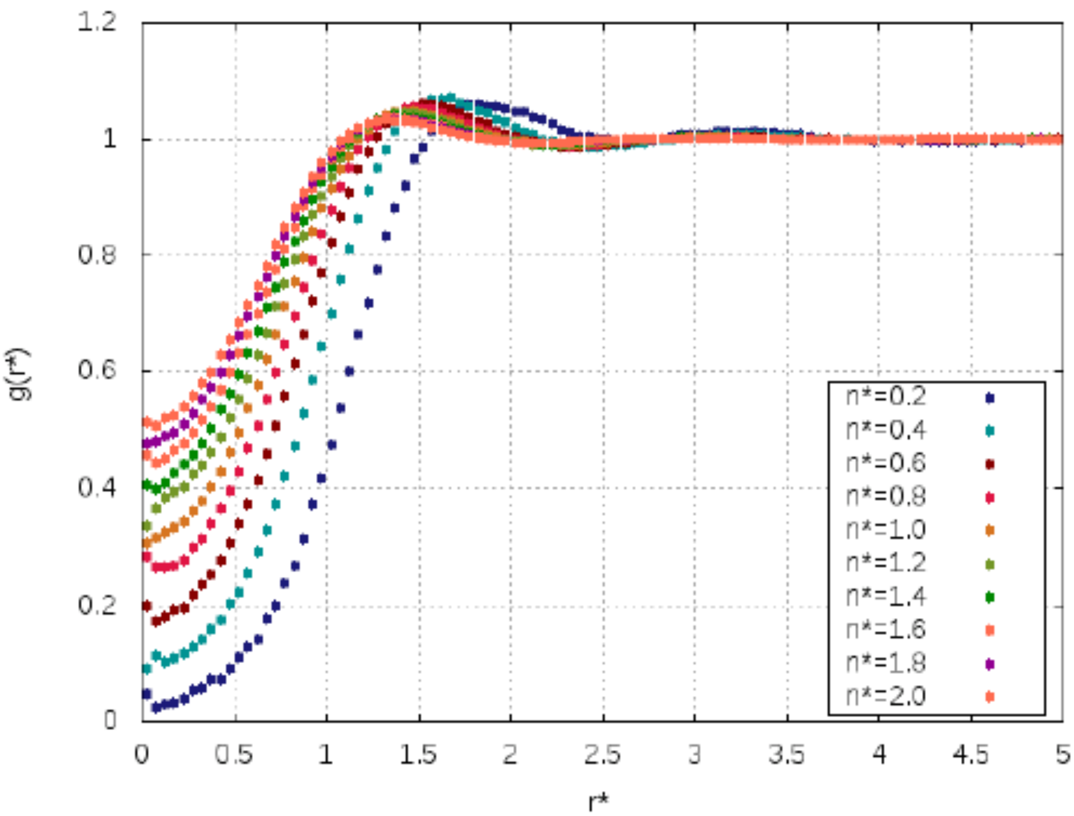

FIGURA 2: Función de distribución radial a diferentes concentraciones reducidas.