



UNIVERSIDAD DE SONORA
Departamento de Física

DESARROLLO EXPERIMENTAL II
PORTAFOLIO III - TAREA V
Por WyL Alberto Félix Guillen

Objetivo: Mostrar los avances en la implementación de su código de simulación de Dinámica Browniana (NVT) para un sistema de partículas coloidales cargadas con el modelo de Yukawa (Y) en bulto, realizando las actividades que se incluyen a continuación.

Sistema Modelo

En esta actividad estudiamos un sistema de partículas coloidales cargadas con el modelo de Yukawa (Y). Conviene entonces hacer una breve revisión sobre aspectos de éste potencial tal como la reducción de variables.

El potencial de Yukawa puede escribirse en la forma

$$u(r) = A \frac{\exp[-\kappa(r - \sigma)]}{r},$$

para $r > \sigma$, con r la distancia entre cada par de partículas y σ su diámetro. Como es usual, procederemos a realizar la reducción del potencial $u(r)$ para utilizarlo en la simulación. Reescribiendo el potencial

$$\begin{aligned} u(r) &= A \frac{\exp[-\kappa(r - \sigma)]}{r}, \\ &= A \frac{\exp[-\kappa\sigma(\frac{r}{\sigma} - 1)]}{r}, \\ &= \frac{A}{\sigma} \frac{\exp[-\kappa\sigma(\frac{r}{\sigma} - 1)]}{\frac{r}{\sigma}}, \\ &= \frac{A \exp(\kappa\sigma)}{\sigma} \frac{\exp[-\kappa\sigma(\frac{r}{\sigma})]}{\frac{r}{\sigma}}, \end{aligned}$$

multiplicando por β

$$u^*(r^*) = A^* \frac{\exp(-\kappa^* r^*)}{r^*},$$

donde

$$\begin{aligned} u^*(r^*) &= \beta u(r^*), \\ A^* &= \frac{\beta A \exp(\kappa\sigma)}{\sigma}, \\ r^* &= \frac{r}{\sigma}, \\ \kappa^* &= \kappa\sigma. \end{aligned}$$

El potencial reducido $u^*(r^*)$, como ya se había anticipado, será el que implementaremos en el código.

Actividad 1

Muestre el comportamiento de un sistema con fracción en volumen $\phi = 0,00044$, parámetro de apantallamiento $\kappa = 0,149$ e intensidad del potencial $A = 556$. Comenzar con una configuración inicial regular cuadrada. Seleccione usted los parámetros de simulación que considere pertinentes y documente mostrando gráficamente lo siguiente:

- Curva de termalización de la energía potencial por partícula vs configuración.
- Configuración inicial.
- Configuración final.
- "Trayectoria" de una trazadora seleccionada arbitrariamente.

Los parámetros de simulación elegidos se muestran en la tabla 1.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	512
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.00044
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.14900
Intensidad del potencial (A)	556
Tiempo de paso (DT)	0.00040

Tabla 1

En la figura 1 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

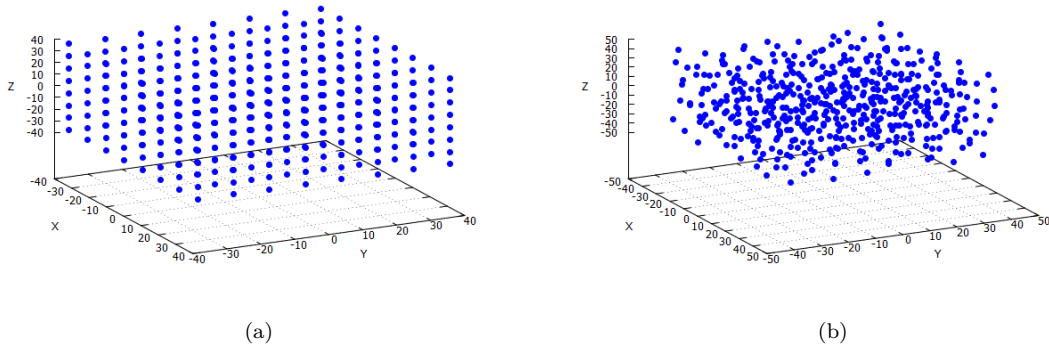


Figura 1: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial regular. La energía total de la configuración inicial es $E = 103,1243$. En la **figura (b)** se muestra la configuración final; se observa que las partículas se movieron de lugar pero sin formar alguna estructura aparente.

La curva de termalización de este sistema se muestra en la figura 2. El programa selecciona arbitrariamente alguna de las N partículas y sigue sus posiciones. En este caso la partícula trazadora fue la número 343, cuya traza se muestra en la figura 3 (a). En la figura 3 (b) se muestra la función de distribución radial $g(r^*)$. Finalmente, en la figura 4 se muestra tanto el desplazamiento cuadrático medio como el coeficiente de difusión.

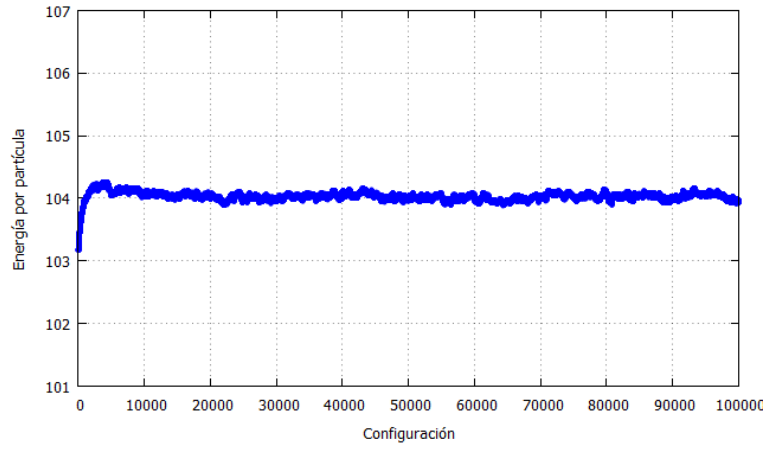


Figura 2: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 80000.

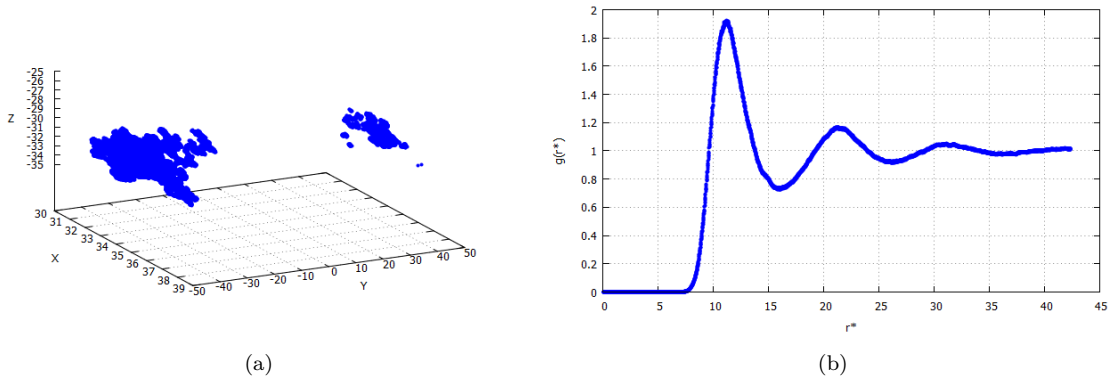


Figura 3: En la **figura (a)** se muestra la partícula trazadora: 343. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución radial $g(r^*)$.

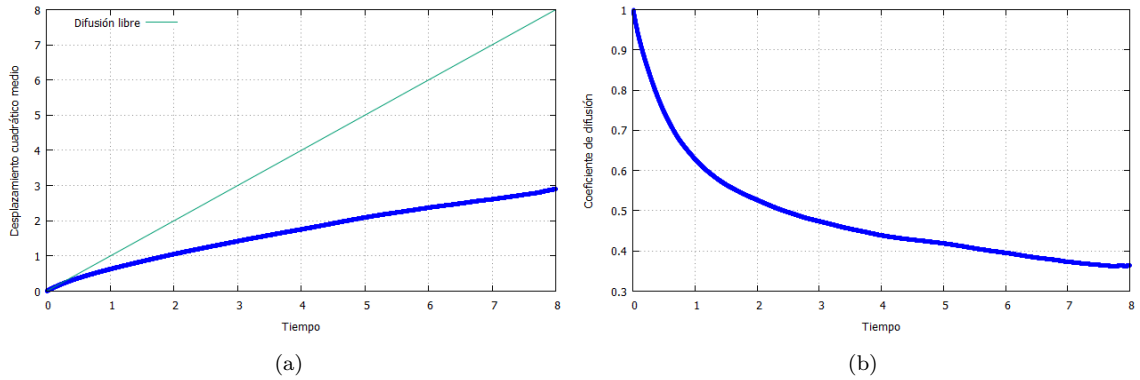


Figura 4: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión.

Actividad 2

Muestre el comportamiento de un sistema con fracción de volumen alta ($\phi = 0,006$ o $\phi = 0,007$) y mismos parámetros para κ y A de la Actividad 1. Partir de una configuración inicial aleatoria. Seleccionar los parámetros de simulación que considere pertinentes y documentar mostrando gráficamente lo siguiente:

- Curva de termalización de la energía potencial por partícula vs configuración.
- Configuración inicial.
- Configuración final.
- "Trayectoria" de una trazadora seleccionada arbitrariamente.

Los parámetros de simulación elegidos se muestran en la tabla 2.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	343
Configuraciones totales (NSTEP)	80000
Configuración de equilibrio (NENER)	60000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.006
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.14900
Intensidad del potencial (A)	556
Tiempo de paso (DT)	0.00030

Tabla 2

En la figura 5 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

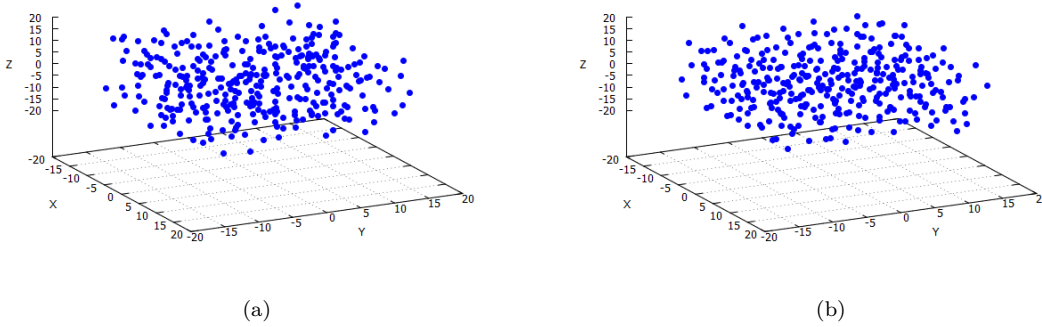


Figura 5: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria sin traslapes. La energía total de la configuración inicial es $E = 1375,6064$. En la **figura (b)** se muestra la configuración final; se observa que las partículas se movieron de lugar pero sin formar alguna estructura aparente.

La curva de termalización de este sistema se muestra en la figura 6. El programa selecciona arbitrariamente alguna de las N partículas y sigue sus posiciones. En este caso la partícula trazadora fue la número 275, cuya traza se muestra en la figura 7 (a). En la figura 7 (b) se muestra la función de distribución radial $g(r^*)$. Finalmente, en la figura 8 se muestra tanto el desplazamiento cuadrático medio como el coeficiente de difusión.

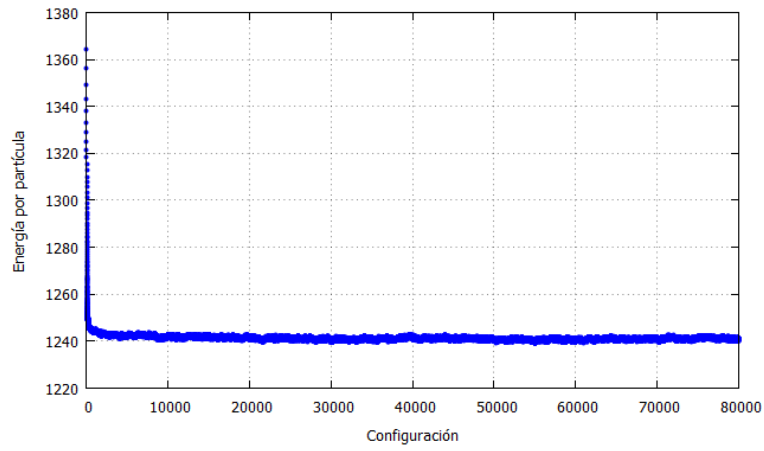


Figura 6: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 60000.

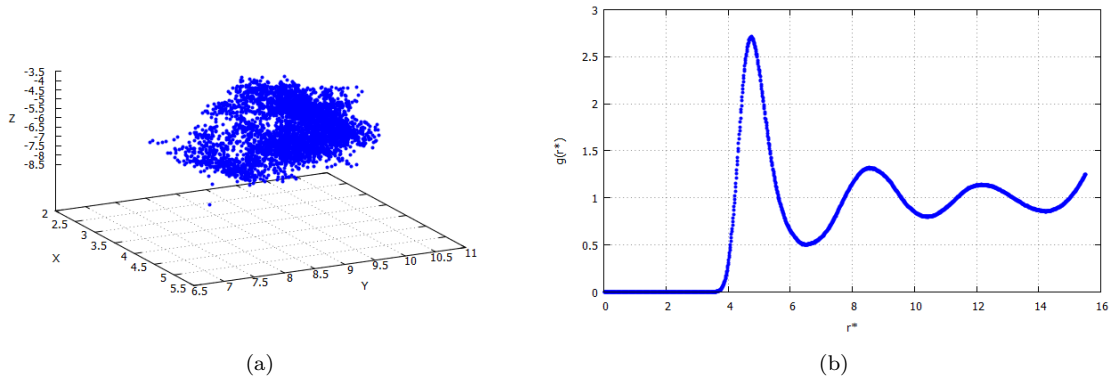


Figura 7: En la **figura (a)** se muestra la partícula trazadora:275. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución radial $g(r^*)$.

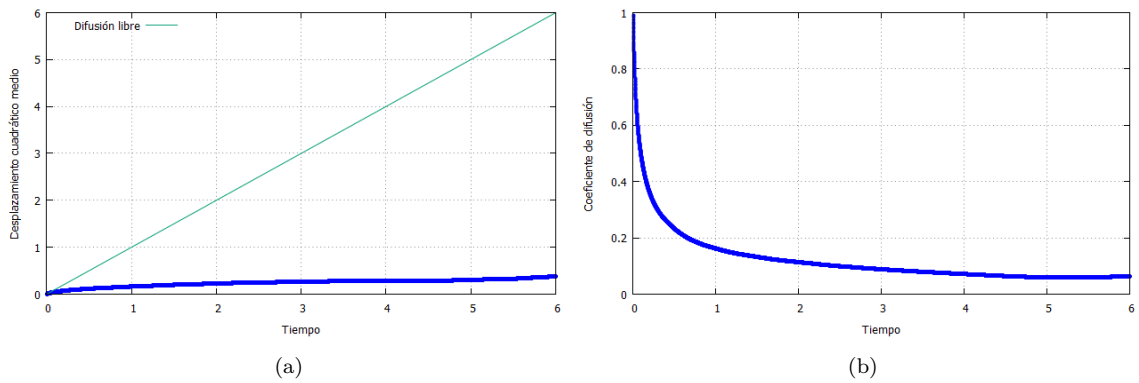


Figura 8: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión.

Actividad 3

Implementar las subrutinas para el cálculo de la función de distribución radial $g(r^*)$. Entre todos los compañeros de la clase, pónganse de acuerdo solamente en dos fracciones en volumen (alta y baja) del sistema de Yukawa para κ y A de la Actividad 1. Calculen de forma independiente esta propiedad estructural. Compartirse entre Ustedes los archivos de resultados para $g(r^*)$ y mostrar en una sola gráfica la superposición de sus resultados, incluyendo los suyos con símbolos y los de sus compañeros con líneas. Se acordaron los siguientes valores para la concentración en volumen:

$$\begin{aligned}\phi_{baja} &= 0,00033, \\ \phi_{alta} &= 0,009.\end{aligned}$$

Con los tiempos de paso:

$$\begin{aligned}DT_1 &= 0,0002, \\ DT_{W_yL} &= 0,0003, \\ DT_3 &= 0,0004, \\ DT_4 &= 0,0005.\end{aligned}$$

Para **fracción en volumen baja**, la función de distribución radial $g(r^*)$ para cada uno de los valores del tiempo de paso DT se muestra en la figura 9.

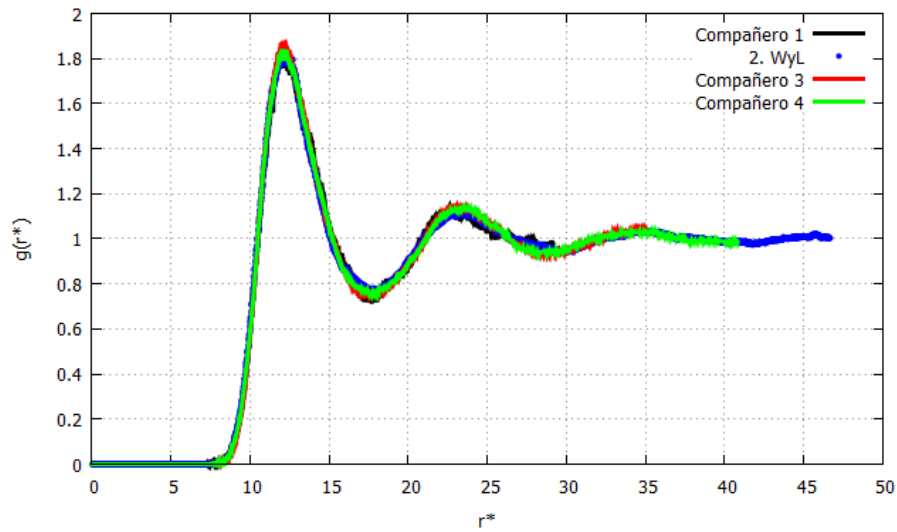


Figura 9: Los cuatro resultados coinciden.

Para **fracción en volumen alta**, la función de distribución radial $g(r^*)$ para cada uno de los valores del tiempo de paso DT se muestra en la figura 10. En este caso se observan grandes diferencias entre los compañeros 1 y 3 con mis resultados y los del compañero 4. Desconozco en que condiciones obtuvieron estos resultados.

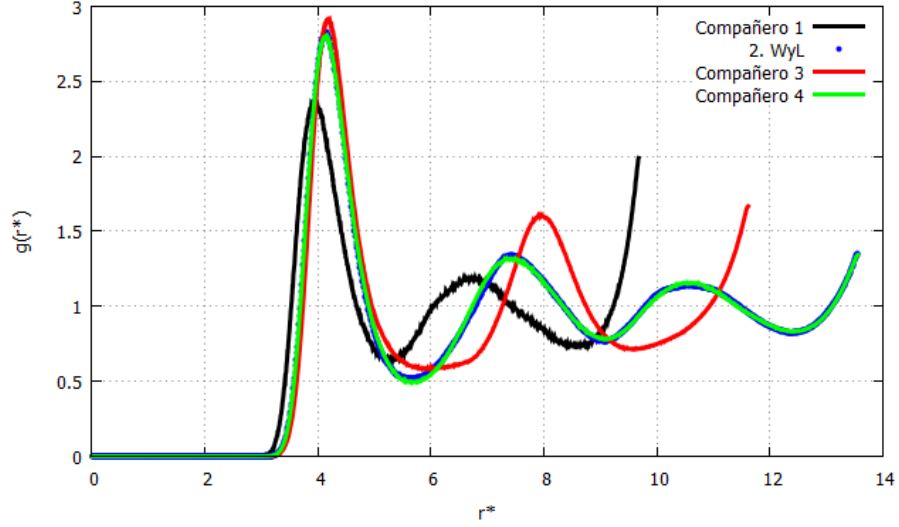


Figura 10: Solo dos de los cuatro resultados coinciden, el mio y el de Manuel (compañero 4). Desconozco cual sea el motivo de la diferencia con los otros dos resultados.

Actividad 4

Implementar su código de simulación de Dinámica Browniana para calcular la $g(r^*)$ considerando $\phi = 0,00044$ y $\kappa = 0,149$ fijos, para los valores de la intensidad del potencial siguientes $A = 356$, 556 y 756 . Muestre sus resultados en una gráfica comparativa. En la figura 11 se muestran los resultados obtenidos para los parámetros especificados en la actividad.

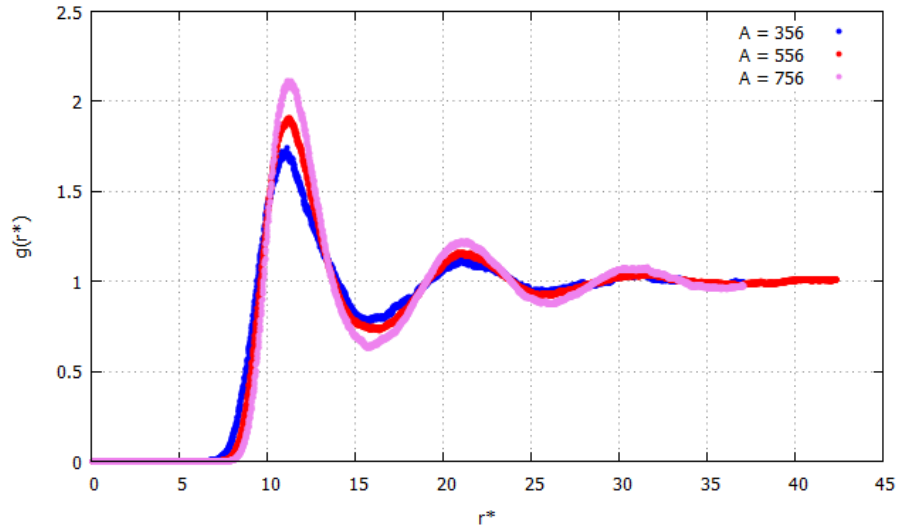


Figura 11: Función de distribución radial $g(r^*)$ para $\phi = 0,00044$ y $\kappa = 0,149$ fijos y $A = 356$, 556 y 756 .

Se observa que, consecuencia de aumentar la intensidad de interacción entre las partículas, los picos de la $g(r^*)$ se hacen más pronunciados, indicando que hay más partículas alrededor de cada una de las partículas. Además, se desplazan ligeramente a la derecha cuando aumenta la intensidad de la interacción.

Actividad 5

Implementar su código de simulación de Dinámica Browniana para calcular la $g(r^*)$ considerando $\phi = 0,00044$ y $A = 556$ fijos, para los valores del parámetro de apantallamiento $\kappa = 0,05, 0,149$ y $0,5$. Muestre sus resultados en una gráfica comparativa. En la figura 12 se muestran los resultados obtenidos para los parámetros especificados en la actividad.

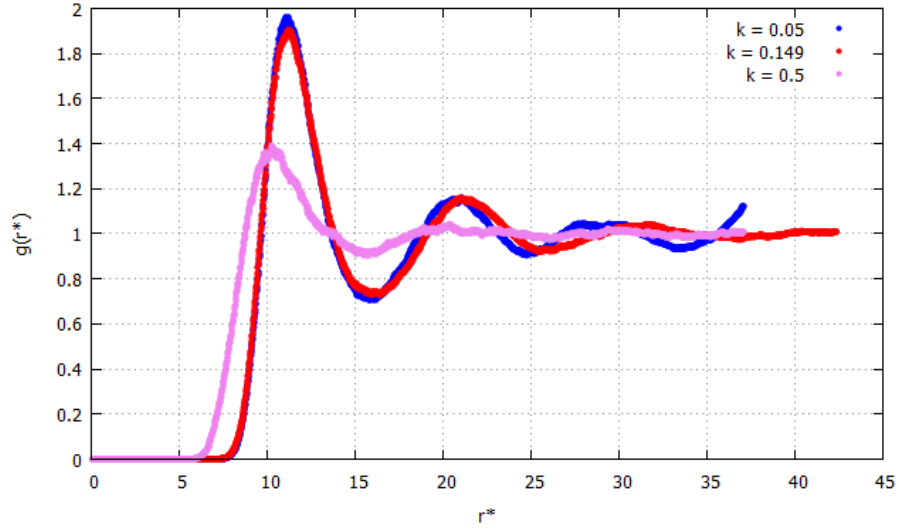


Figura 12: Función de distribución radial $g(r^*)$ para $\phi = 0,00044$ y $A = 556$ fijos y $\kappa = 0,05, 0,149$ y $0,5$.

Se observa que, consecuencia de aumentar el factor de la exponencial que aparece en el potencial de interacción entre las partículas, los picos de la $g(r^*)$ se hacen menos pronunciados, lo cual está en acuerdo con el caso anterior, en el que κ estaba fija y variaba A . Cuanto más grande se hace el factor κ en la exponencial negativa, menor es la intensidad de interacción entre las partículas, lo cual es equivalente a disminuir A en la actividad anterior. Obsérvese además que cuando $\kappa = 0,05$ la $g(r^*)$ no tiende a 1 para valores grandes de r^* .

Un caso interesante

Los parámetros de simulación elegidos se muestran en la tabla 3.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.003
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial (A)	556
Tiempo de paso (DT)	0.003

Tabla 3

En la figura 13 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

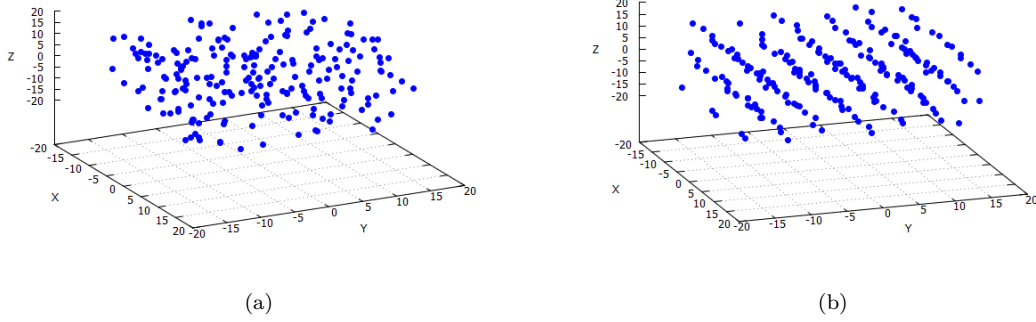


Figura 13: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria sin traslapes. En la **figura (b)** se muestra la configuración final; se observan regularidades en esta configuración, y esto es lo interesante.

La proyección de la configuración final sobre el plano XY se muestra en la figura 14.

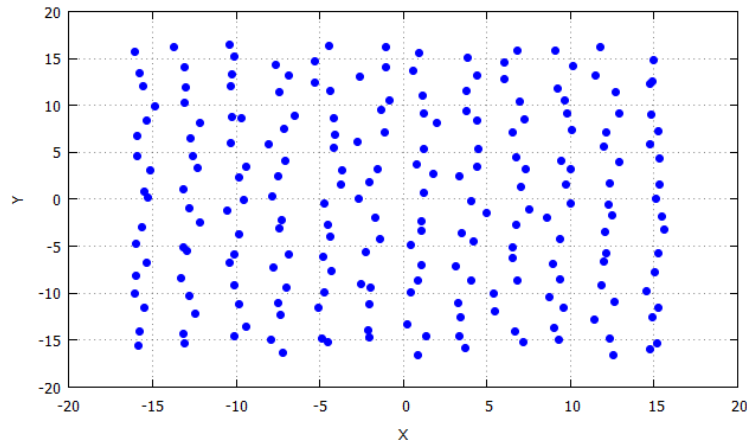


Figura 14: Proyección de la configuración final sobre el plano XY.

En la figura 15 se muestra la función de distribución radial $g(r^*)$.

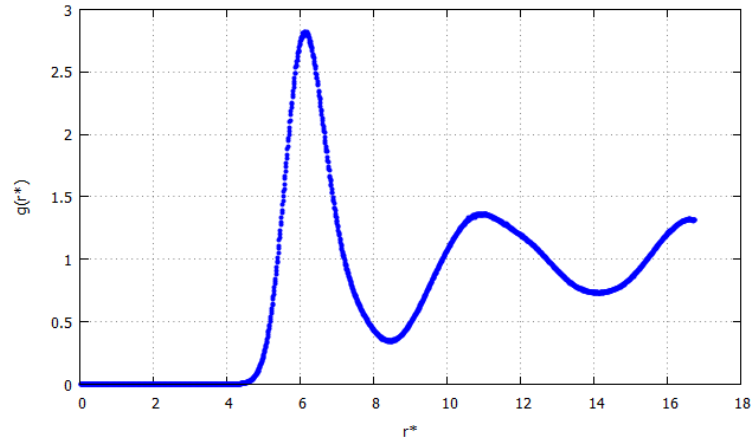


Figura 15: Función de distribución radial $g(r^*)$.

Este caso es interesante por la regularidad que se obtuvo en la configuración final.

Evidencias

En la presente sección se agregan las evidencias de termalización de la energía para las actividades 3, 4 y 5.

Evidencias de Actividad 3: En la figura 16 se muestran las curvas de termalización para el caso de ϕ_{baja} y ϕ_{alta} .

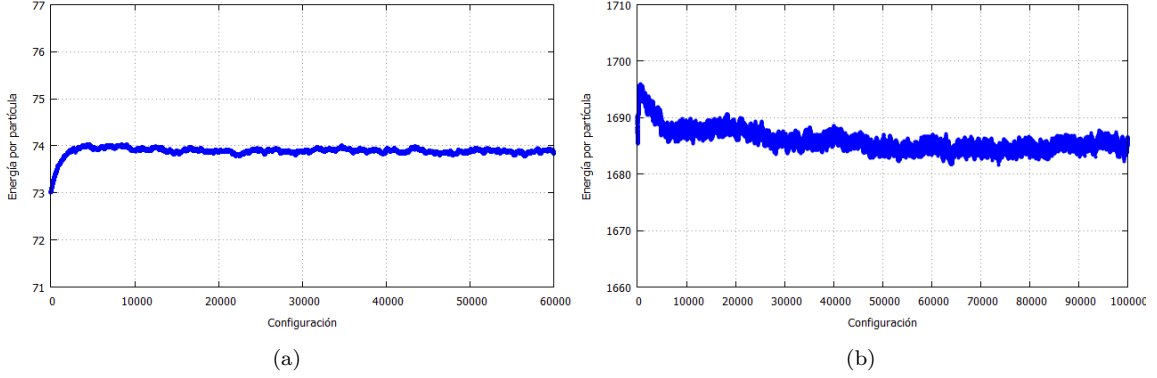


Figura 16: En la **figura (a)** se muestra la energía por partícula para el caso de ϕ_{baja} ; las configuraciones se almacenaron a partir de la configuración 40000. En la **figura (b)** se muestra la energía por partícula para el caso ϕ_{alta} ; las configuraciones se almacenaron a partir de la configuración 80000.

Evidencias de Actividad 4: En la figura 17 se muestran las curvas de termalización para los distintos valores de A .

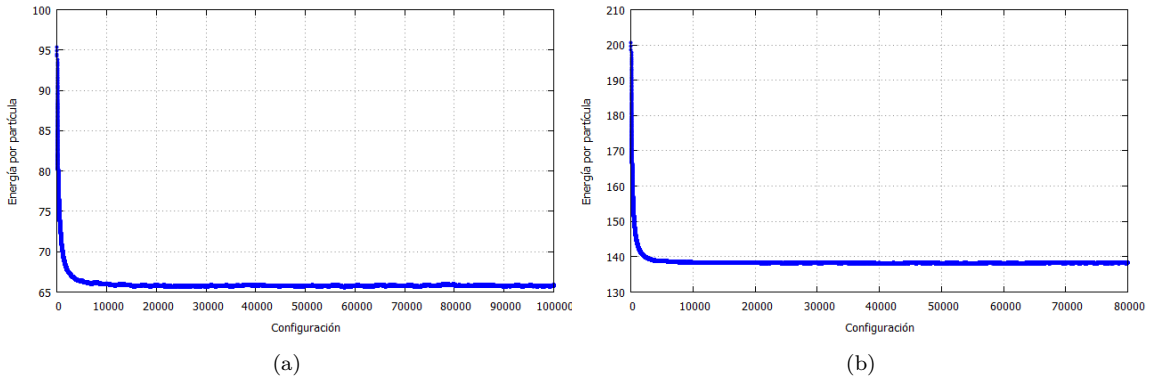


Figura 17: En la **figura (a)** se muestra la energía por partícula para el caso de $A = 356$; las configuraciones se almacenaron a partir de la configuración 90000. En la **figura (b)** se muestra la energía por partícula para el caso $A = 756$; las configuraciones se almacenaron a partir de la configuración 60000. Se omitió el caso $A = 556$ pues se tomaron los mismos datos que en la figura 16 (a).

Evidencias de Actividad 5: En la figura 18 se muestran las curvas de termalización para los distintos valores de κ .

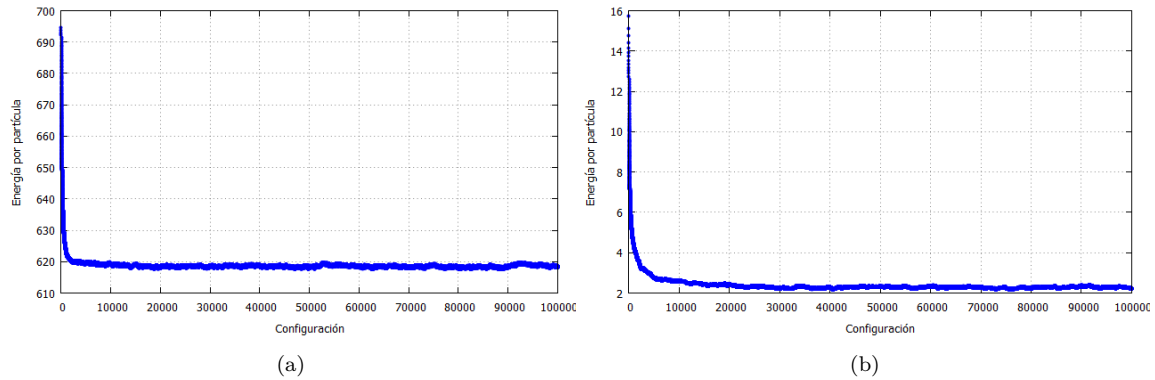


Figura 18: En la **figura (a)** se muestra la energía por partícula para el caso de $\kappa = 0,05$; las configuraciones se almacenaron a partir de la configuración 80000. En la **figura (b)** se muestra la energía por partícula para el caso $\kappa = 0,5$; las configuraciones se almacenaron a partir de la configuración 80000. Se omitió el caso $\kappa = 0,149$ pues se tomaron los mismos datos que en la figura 16 (a).

Comentarios y observaciones finales

En las actividades 1 y 2, aunque no se solicita, se incluyó el cálculo del desplazamiento cuadrático medio y el coeficiente de difusión por completez. Evidentemente, el resultado más curioso es el presentado en la actividad 3, donde dos de mis compañeros difieren con todos los demás, incluso entre ellos. Hice la simulación para verificar que esos resultados coincidieran con los míos y así fue, coincidieron. Es interesante cuan importante es el valor del DT para obtener unos resultados u otros.

Referencias

- [1] Sitio de Laura: <http://paginas.fisica.uson.mx/laura.yeomans/dex2191/>.