



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO - MEC
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ - UFPI
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO - PRPPG
COORDENADORIA GERAL DE PESQUISA - CGP
PROGRAMA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA - PIBIC - UFPI
CAMPUS UNIVERSITÁRIO MINISTRO PETRÔNIO PORTELA -
BLOCO 06 - BAIRRO ININGA CEP: 64049-550 - TERESINA-PI -
BRASIL - FONE: (86) 3215-5564 - FONE/FAX: (86) 3215-5560

Propagador para uma partícula quântica interagindo com um reservatório

Orientando: Marcondes Tiburcio da Silva Junior - Física - DF - UFPI.

Orientador: Prof. Dr. Irismar Gonçalves da Paz - DF - UFPI.

Teresina - PI.

Fevereiro de 2017

Resumo

Temos por objetivo estudar os efeitos do meio compressor em nanotubos de carbono, ou seja, a pressão que um fluido pode exercer nesta nanoestrutura de carbono em questão. Simulações computacionais serão usadas para o estudo do ordenamento espacial dessa matéria, sendo o algoritmo de Verlet o responsável pelo cálculo da dinâmica molecular de um fluido dentro de um sistema. Utilizaremos o algoritmo, primeiramente, para simular o movimento de um número arbitrário de partículas que irão representar as partículas que compõem o gás de argônio. Em seguida, adicionamos ao código um gerador de números aleatórios e as condições periódicas de contorno para que o sistema se aproxime ao máximo do real, para depois introduzirmos o potencial de Lenard-Jones, o que nos dará a força entre as partículas, a aceleração de cada uma delas, a energia cinética e a temperatura do sistema.

Contents

1 Introdução

É de importância para a ciência o estudo das características da matéria, como por exemplo, os seus estados sólido, líquido e gasoso, e como se encontra o ordenamento espacial dos seus constituintes. A simulação feita por computadores é um método utilizado para compreender as propriedades dessa matéria.

No método da dinâmica molecular, as leis de Newton são aplicadas em átomos ou moléculas – desprezando os efeitos quânticos – para que seja obtida a trajetória de um certo número de partículas em um dado tempo, e assim calcular as propriedades de interesse do sistema. As simulações computacionais são importantes também por poderem reproduzir cenários difíceis, ou até mesmo impossíveis de serem reproduzidos por experimentos.

Uma das ferramentas que podemos utilizar para investigar o ordenamento do sistema é a função radial de pares. Neste trabalho iremos ilustrar o cálculo desta função $g(r)$ para o Argônio bidimensional. Os aspectos essenciais deste sistema são razoavelmente bem capturados pelo modelo Lennard-Jones. A descrição de fluidos e sólidos, em algumas situações, deve ser feita em duas dimensões como, por exemplo, quando estão sendo investigados filmes finos. As simulações bidimensionais, por exigirem poucos recursos computacionais e facilitarem a visualização gráfica de certas quantidades físicas, se tornam muito convenientes.

2 Metodologia

Daremos início a uma introdução ao potencial que descreve a interação entre as partículas, o potencial de Lenard-Jones. A seguir discutiremos a teoria sobre a função radial de pares $g(r)$. Logo após, apresentaremos o conceitos que servem de base para a dinâmica molecular, abordando os algoritmos a serem usados, as condições periódicas de contorno e a convenção da mínima imagem. Seguiremos com os resultados obtidos. E, por fim, apresentaremos os resultados obtidos.

3 Potencial de interação entre partículas

Considerando que trabalharemos com um sistema de N partículas onde sua dinâmica pode ser tratada de forma clássica. A interação entre as partículas depende da distância entre elas, logo, o potencial de Lennard-Jones descreve essas interações para diversos sistemas reais e será adotado

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

sendo que σ é usado como unidade de comprimento, ϵ como de energia, r é a distância entre as partículas e usando m como parâmetro de massa. Na Fig. 1 podemos ver esse potencial parametrizado para o Argônio, no qual podemos observar a parte atrativa, onde a energia tende a 0(zero) e a distância é crescente, e a repulsia, onde ($r \rightarrow 0$).

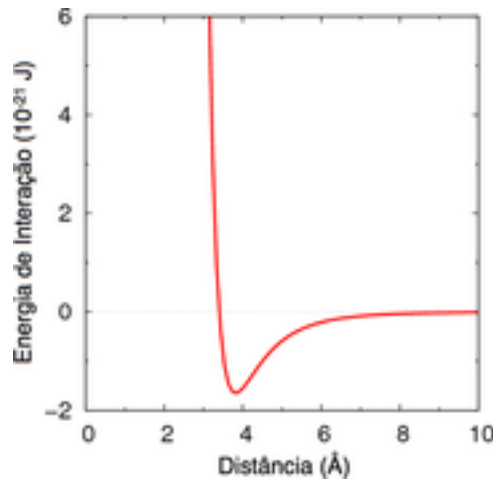


Figure 1: Potencial de Lennard-Jones para o Argônio.

4 Função radial de distribuição de pares

A função radial de distribuição de pares é uma medida de correlação entre as partículas de um sistema de muitos corpos. Escolhendo uma das partículas como referencial(origem), pode-se obter o número médio de partículas a uma distância de r a $r + dr$, que é $\rho g(r)dr$, sendo que $g(r)$ é a função radial de distribuição de pares, que funciona como uma "densidade local", ou seja, quando $g(r) = 1$ essa é a densidade média do sistema, quando a função

adquire valores mais altos a densidade local é maior, e quando adquire valores menores a densidade é menor que a média.

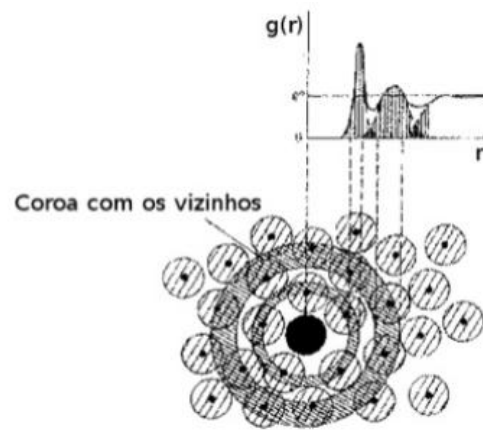


Figure 2: Uma partícula foi fixada na origem, e desenhamos as coroas circulares em relação a ela. O número de partículas em cada coroa da origem à função $g(r)$ resultante.

5 Dinâmica molecular

5.1 Algoritmo de Verlet

Para computar as trajetórias das N partículas e realizar a simulação de dinâmica molecular, é necessário um algoritmo capaz de:

- resolver numericamente as equações de Newton;
- calcular as posições e velocidades das partículas em um instante t e $t + dt$;
- de permitir o uso de um Δt relativamente grande;
- calcular as trajetórias clássicas com precisão;
- conservar energia e *momentum*;
- *ser reversível no tempo*;
- *ser computacionalmente não dispendioso*.

Para o cálculo das trajetórias através do algoritmo de verlet serão utilizadas as equações de Newton para posição

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n (\Delta t)^2, \quad (2)$$

e para velocidade

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2} (a_{n+1} + a_n) (\Delta t). \quad (3)$$

5.2 Gerador de números aleatórios

Para que o sistema simulado seja o mais próximo do real, foi vista a necessidade de inserir um código que fosse capaz de gerar números aleatórios para as posições e velocidades iniciais de cada partícula. Tal gerador utiliza o tempo de máquina para que a cada vez que o programa for executado, sejam gerados numeros aleatórios diferentes dos que forem gerados nas próximas execuções.

```

DO a=1, Na

    call random_seed(size=k)
    allocate(seed(1:k))
200 call date_and_time(values=values)

    seed(:) = (a*5)*values(8)
    call random_seed(put=seed)
    call random_number(r)

    seed(:) = (a*500)*values(8)
    call random_seed(put=seed)
    call random_number(s)

    theta=r*PI
    phi=s*2*PI

    w0(a,1) = modw0*SIN(theta)*COS(phi)
    w0(a,2) = modw0*SIN(theta)*SIN(phi)
    w0(a,3) = modw0*COS(theta)

    pt(a,1) = r*B
    pt(a,2) = s*B
    pt(a,3) = r*s*B

    DO j=1,a-1
        xij=pt(a,1)-pt(j,1)
        yij=pt(a,2)-pt(j,2)
        zij=pt(a,3)-pt(j,3)
        d=sqrt(xij**2+yij**2+zij**2)
        IF(d.lt.4.0) GO TO 200
    END DO

    write(*,*) 'PARTICULA',a, 'ESTA OK!!'
    write(*,*) w0(a,1), w0(a,2), w0(a,3), pt(a,1), pt(a,2), pt(a,3)
    DEALLOCATE(seed)
ENDDO
RETURN
END SUBROUTINE

```

Figure 3:

5.2.1 Cálculo da posição e velocidade

Serão utilizadas também funções do próprio algoritmo para realizar o cálculo – classicamente – do deslocamento das partículas:

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) - r(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2 + O(\Delta t)^4 \quad (4)$$

e também,

$$v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t}, \quad (5)$$

onde ambas as equações (4) e (5) serão utilizadas diretamente nos cálculos feitos na linguagem de programação Fortran(90), que foi a utilizada para realizar a simulação em questão, representado na imagem abaixo.

```
rt(I,J,1)=2*rt(I,J-1,1)-rt(I,J-2,1)+at(I,1)*(dt**2)
rt(I,J,2)=2*rt(I,J-1,2)-rt(I,J-2,2)+at(I,2)*(dt**2)
rt(I,J,3)=2*rt(I,J-1,3)-rt(I,J-2,3)+at(I,3)*(dt**2)

vt(I,1)=(rt(I,J,1)-rt(I,J-2,1))/(2*dt)
vt(I,2)=(rt(I,J,2)-rt(I,J-2,2))/(2*dt)
vt(I,3)=(rt(I,J,3)-rt(I,J-2,3))/(2*dt)
```

Figure 4: Cálculo da posição(rt) e da velocidade(vt), através das equações (4) e (5), utilizando Fortran 90.

5.2.2 Cálculo da força através do potencial de Lennard-Jones e da aceleração

Tal força pode ser obtida através do gradiente do potencial de interação como mostrado na equação

$$F(r) = -\nabla V(r) = \frac{24\epsilon}{r} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \hat{r}, \quad (6)$$

onde podemos perceber que foi necessário o cálculo da distância entre cada partícula.

As componentes da acelerações a_n são obtidas através da Segunda Lei de Newton, utilizando massa atômica do argônio e as componentes da força

$$a_n^x = \frac{F(r)^x}{m} \quad (7)$$

$$a_n^y = \frac{F(r)^y}{m} \quad (8)$$

```

SUBROUTINE vetores(st,Na,ac,mar)
INTEGER :: a, b, Na
REAL(KIND=8), DIMENSION(:,,:), INTENT(INOUT) :: st(Na,3), ac(Na,3)
REAL(KIND=16) :: stmod, stabx, staby, stabz, sig, eps, Frx, Fry, Frz, acx, acy, acz, acmod
REAL(KIND=16) :: mar

sig=3.41
eps=0.01
DO a=1, Na
  ac(a,1)=0.
  ac(a,2)=0.
  ac(a,3)=0.
ENDDO

DO a=1, Na-1
  DO b=a+1, Na

    stabx=st(a,1)-st(b,1)
    staby=st(a,2)-st(b,2)
    stabz=st(a,3)-st(b,3)
    stmod=sqrt((stabx)**2+(staby)**2+(stabz)**2)

    Frx=((24.*eps)/stmod)*(2.*(sig/stmod)**12 - (sig/stmod)**6)*(stabx/stmod)
    Fry=((24.*eps)/stmod)*(2.*(sig/stmod)**12 - (sig/stmod)**6)*(staby/stmod)
    Frz=((24.*eps)/stmod)*(2.*(sig/stmod)**12 - (sig/stmod)**6)*(stabz/stmod)

    ac(a,1)=ac(a,1)+(1./mar)*Frx
    ac(a,2)=ac(a,2)+(1./mar)*Fry
    ac(a,3)=ac(a,3)+(1./mar)*Frz

    ac(b,1)=ac(b,1)-(1./mar)*Frx
    ac(b,2)=ac(b,2)-(1./mar)*Fry
    ac(b,3)=ac(b,3)-(1./mar)*Frz

  ENDDO
ENDDO
RETURN
END SUBROUTINE

```

Figure 5: aaaaaa

$$a_n^z = \frac{F(r)^z}{m} \quad (9)$$

6 Conclusões e Perspectivas

Nós estudamos os principais fenômenos da mecânica quântica, sua história e seus fundamentos. O início foi marcado pela dualidade onda e partícula, da luz se estendeu para a matéria com a hipótese de de Broglie comprovada experimentalmente. A matéria que antes só tinha caráter corpuscular, passou a ser representada por uma superposição de muitas ondas, ou seja, um pacote de onda.

Partindo dessas ideias Schrödinger postulou uma equação que descreve a evolução temporal da partícula, equação no qual não apresenta nenhum significado físico, suas grandezas físicas é expressa através de seu módulo ao quadrado. A partir da equação de Schrödinger obtemos a $\psi(x, t)$ para uma partícula livre através da superposição de várias frequências no qual produziria um pacote de onda.

Usualmente, por uma questão de simplicidade, nos estudos da mecânica quântica nós desprezamos os efeitos do ambiente, ou seja, um sistema quântico

fechado. Esse relatório parcial está projetado para obtermos o propagador de Schrödinger para uma partícula livre considerando o dependência do ambiente no relatório final.

7 Agradecimentos

Agradeço a Deus por ter me dado saúde e forças necessárias para continuar firme e forte nas batalhas da vida, aos meus pais por sempre estarem ao meu lado, ao meu orientador pela dedicação em suas pesquisas, incluindo as pesquisas o qual elaborou para seus alunos trabalharem, e aos meus amigos que contribuíram de forma direta ou indireta.

Agradeço a UFPI pelo apoio logístico e financeiro prestado no decorrer da pesquisa,



Figure 6: UFPI

References

- [1] Eisberg, Robert; Resnick, Robert. Física Quântica, 4.ed. Rio de Janeiro: Ed.Campos, 1979;
- [2] Tipler, Paul A. Física Moderna. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1981;
- [3] Física/David Halliday [e] Robert Resnick; tradução [de] Antônio Luciano Leite Videira; Revisão técnica [de] Adir Moyses Luiz, 4.ed.- Rio de Janeiro: LTC-Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1978.
- [4] <http://astro.if.ufrgs.br/med/imagens/fourier.htm>