

# Proyecto II: Dinámica Browniana

Desarrollo Experimental II

**Integrantes:**

Paredes Sosa Martín Alejandro

Orcí Fernández Luisa Fernanda

Mayo, 2018

## Introducción

Las interacciones entre átomos, moléculas y coloides no se superponen debido a la fuerte repulsión a distancias cortas. Debido a esto, dichas interacciones se modelan a distancias menores a una longitud característica del orden de su tamaño, utilizando un potencial de interacción con una alta barrera repulsiva, como el potencial de esfera dura, Yukawa, entre otros.

Existen potenciales llamados "acotados" y "no-acotados". Los potenciales acotados cuentan con un valor finito en el origen, mientras que los "no-acotados" tienen un valor infinitamente positivo en el origen. Para los potenciales "acotados" encontramos potenciales estrictamente repulsivos, tales como el gaussiano o el hookeano. Para los potenciales "no-acotados" contamos con modelos enteramente repulsivos, tales como Yukawa o HD.

Existen potenciales acotados conocidos como modelos FRAC, y son aquellos que poseen una parte repulsiva de corto alcance y un pozo atractivo de alcance medio.

La finalidad de este proyecto es la explorar un sistema coloidal, cuyas partículas interaccionan mediante un potencial FRAC, para lograr esto se hizo uso de simulaciones de dinámica Browniana, utilizando el algoritmo de Ermak para el régimen difusivo.

## Potencial FRAC

El potencial que se utilizó para este proyecto fue el FRAC de doble gaussiana, conocido en la jerga como  $DG$ , el cual tiene la forma

$$u(r) = \epsilon e^{-\left(\frac{r}{\sigma}\right)^2} - \eta e^{-\left(\frac{r-\xi}{\sigma}\right)^2} \quad (1)$$

donde  $\epsilon$ ,  $\sigma$ ,  $\xi$  y  $\eta$  son parámetros definidos y son positivos, dos de ellos de carácter energético ( $\epsilon$  y  $\eta$ ), y los otros dos de longitud. El término doble gaussiana nos indica que corresponde a una superposición de gaussiana repulsiva y atractiva.  $\eta$  es un parámetro que permite sintonizar la intensidad de la contribución atractiva, al hacerla cero, se vuelve al caso de núcleo gaussiano (GCM).

Los parámetros del potencial que se exploraron durante la realización de este proyecto fueron los siguientes

Sistema	$\tilde{\eta}$
GCM	0
DG	0.0263

Esto con  $\xi^* = 3.0$

## Metodología

Para facilitar la implementación de este potencial al código de DB, se definieron las cantidades adimensionales

$$r^* = \frac{r}{\sigma}$$

$$r = \sigma r^*$$

$$\xi^* = \frac{\xi}{\sigma}$$

$$\xi = \sigma \xi^*$$

$$\epsilon^* = \beta \epsilon$$

$$\epsilon = \frac{\epsilon^*}{\beta}$$

Adicionalmente, con el fin de facilitar los calculos, definimos la constante

$$\mu = \frac{\eta}{\epsilon}$$

sustituyendo las cantidades anteriores y a la constante  $\mu$  en la ecuación (1) obtenemos

$$u(r) = \epsilon [e^{-(\frac{r}{\sigma})^2} - \mu e^{-(\frac{r-\xi}{\sigma})^2}]$$

$$\beta u(r^*) = \beta \epsilon [e^{-(\frac{\sigma r^*}{\sigma})^2} - \mu e^{-(\frac{\sigma r^* - \sigma \xi^*}{\sigma})^2}]$$

finalmente

$$u^*(r^*) = \epsilon^* [e^{-r^{*2}} - \mu e^{-(r^* - \xi^*)^2}] \quad (2)$$

el resultado anterior también se puede escribir de la forma

$$u^*(r^*) = \frac{1}{T^*} [e^{-r^{*2}} - \mu e^{-(r^* - \xi^*)^2}] \quad (3)$$

# Resultados

## Calibración del Código DB

Al momento de tener el código estructurado, se le implementó a la simulación de Montecarlo el mismo modelo de potencial, esto con el fin de tener confianza en los resultados obtenidos con DB. Una vez que corroboramos que nuestra simulación de DB coincidía con el modelo de MC, proseguimos con el proyecto.

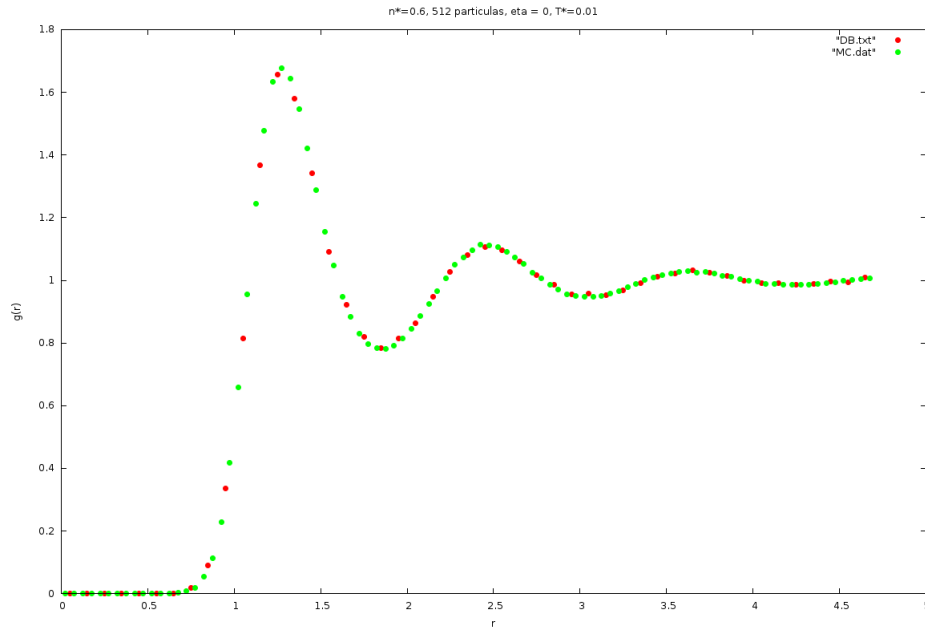


Figura 1: Comparación entre la  $g(r)$  obtenida con MC y DB para el potencial doble gaussiano.

## Propiedades Estructurales

Una vez que se corroboró la veracidad de nuestra simulación, pasamos a dejar fija la temperatura reducida, asignándole el valor de  $T^* = 0.2$ , a su vez, se variaron las concentraciones reducidas en un intervalo de  $[0.2, 2.0]$ , estas se fueron variando de 0.2, en 0.2.

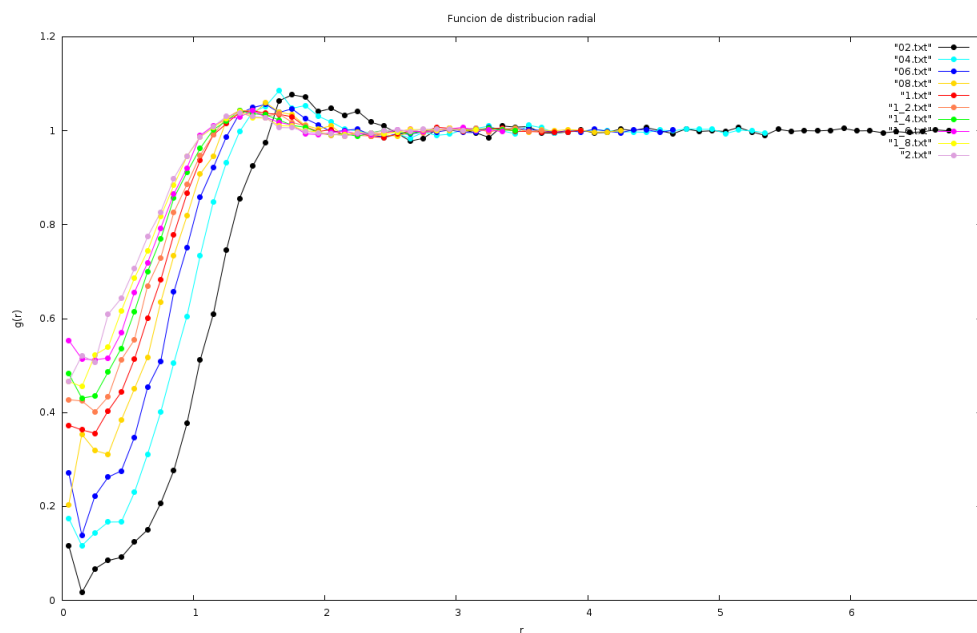


Figura 2: Función de distribución radial para distintas  $n^*$ .

## Propiedades Termodinámicas

Aquí graficamos una ecuación de estado para este tipo de potencial y las distintas gráficas para la energía interna

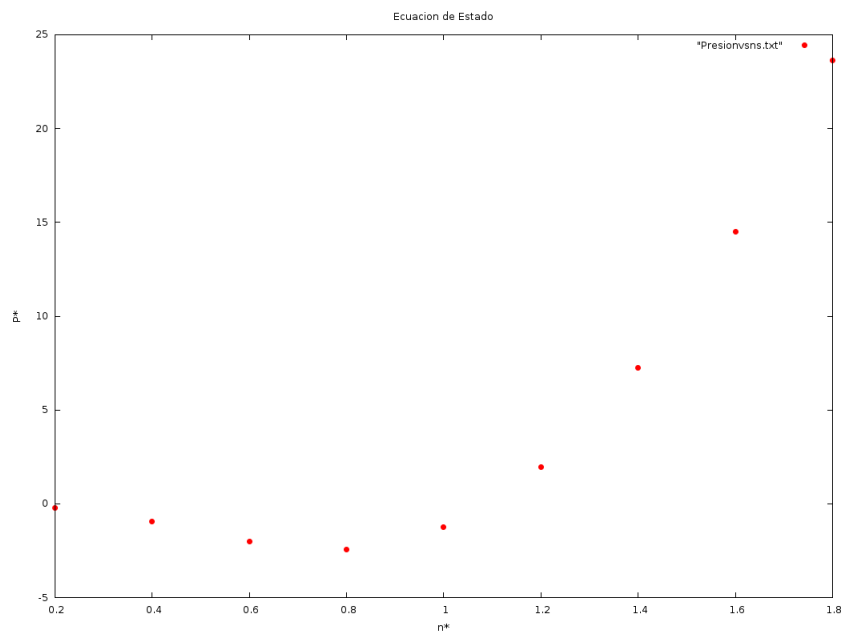


Figura 3: Ecuación de estado  $P^*$  vs  $n^*$

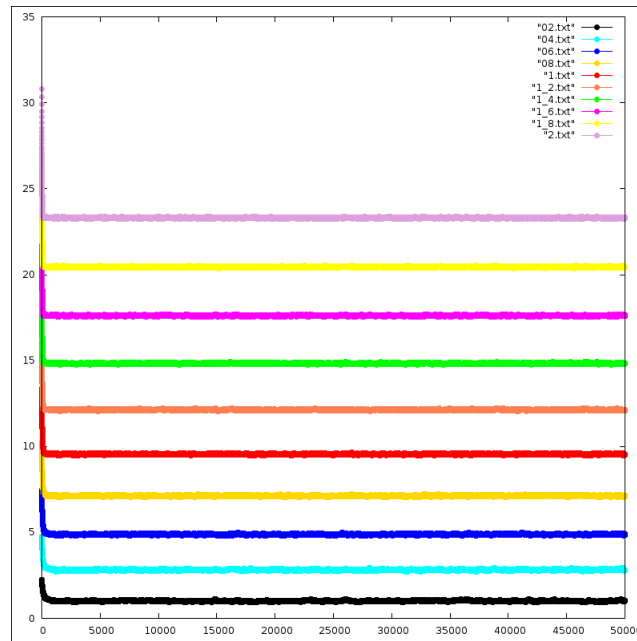


Figura 4: Termalización para un intervalo de  $n^*$  de  $[0.2, 2.0]$

## Propiedades Dinámicas

Aquí calculamos el desplazamiento cuadrático medio para cada una de las concentraciones reducidas

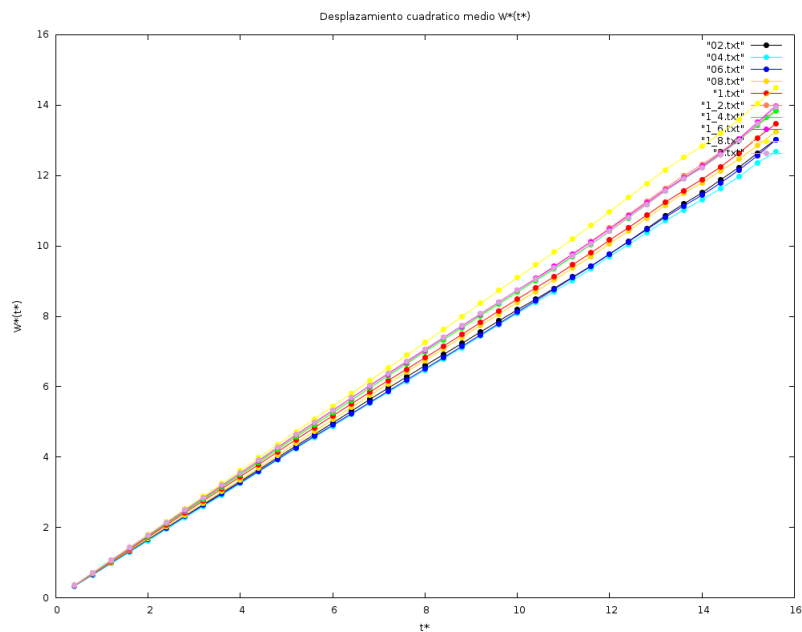


Figura 5: Desplazamiento cuadrático medio para un intervalo de  $n^*$  de  $[0.2, 2.0]$

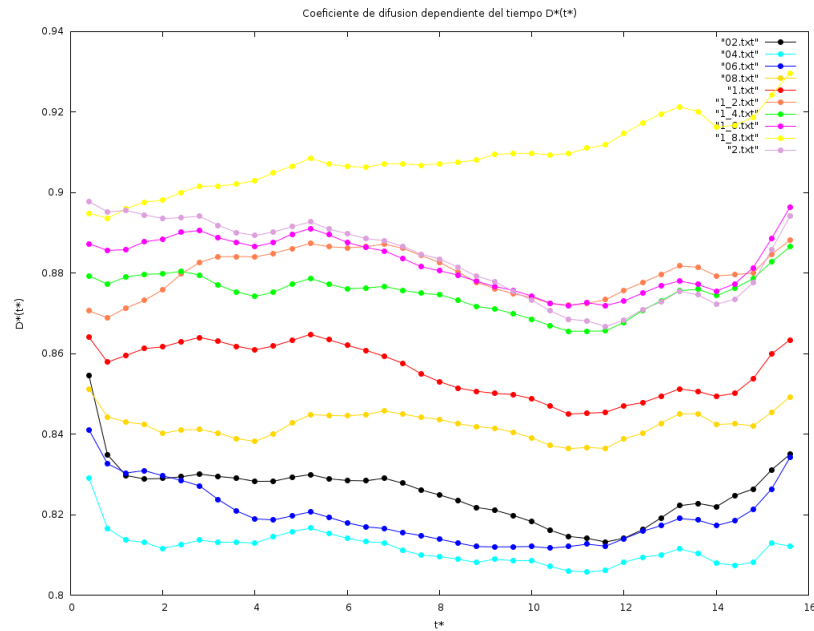


Figura 6: Difusión dependiente del tiempo para un intervalo de  $n^*$  de  $[0.2, 2.0]$

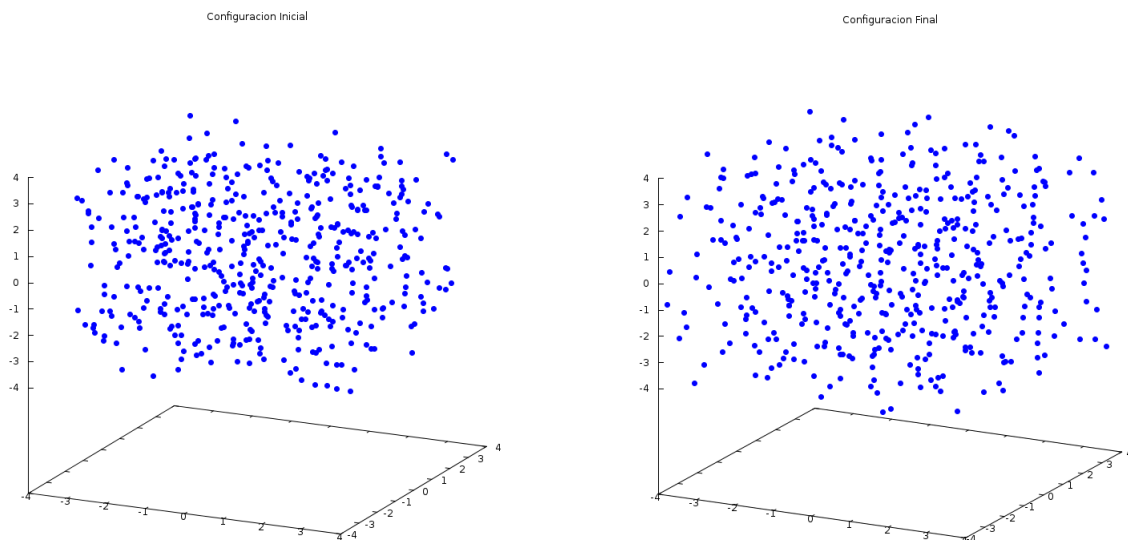
## Exploración de Isocoras

En esta sección del proyecto se exploró el comportamiento del sistema en regiones subcríticas, como el equipo está conformado por dos personas, estos fueron los sistemas asignados de manera aleatoria

Sistema	$n^*$	$T^*$	$P^*$ obtenida	$P^*$ para $T^* = 0.2$
3	1.0	0.11	15.4812469	-1.24442172
4	1.2	0.09	26.0681934	1.96990991

## Sistema 3

Las configuraciones inicial y final



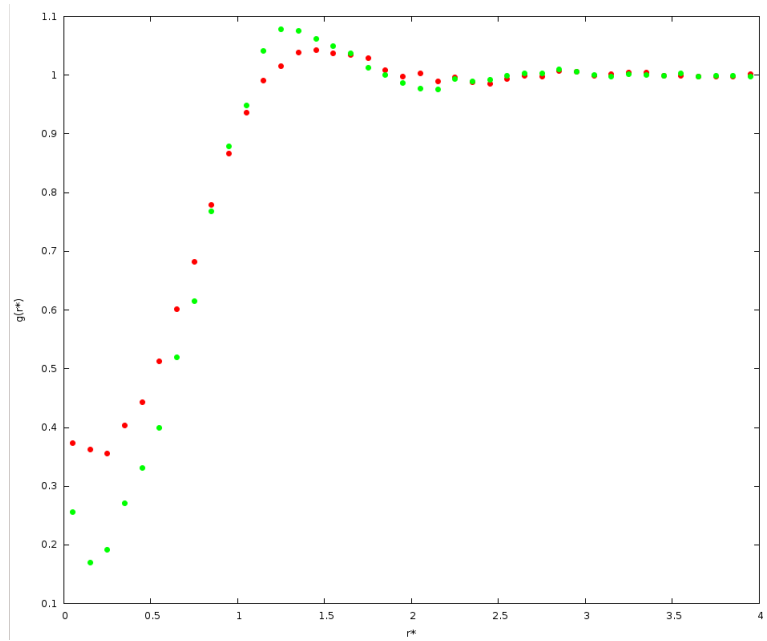


Figura 7: Imagen de la función de distribución radial. La curva verde corresponde al sistema 3 pero con el caso supercrítico  $T^* = 0.2$ , mientras que la curva roja corresponde al sistema 3.

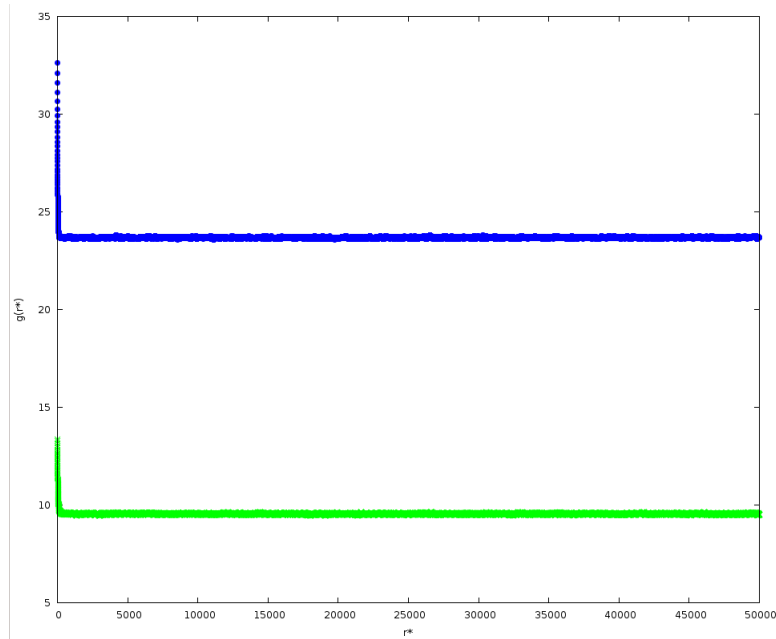


Figura 8: Imagen de la Termalización. La curva verde corresponde al sistema 3 pero con el caso supercrítico  $T^* = 0.2$ , mientras que la curva azul corresponde al sistema 3.

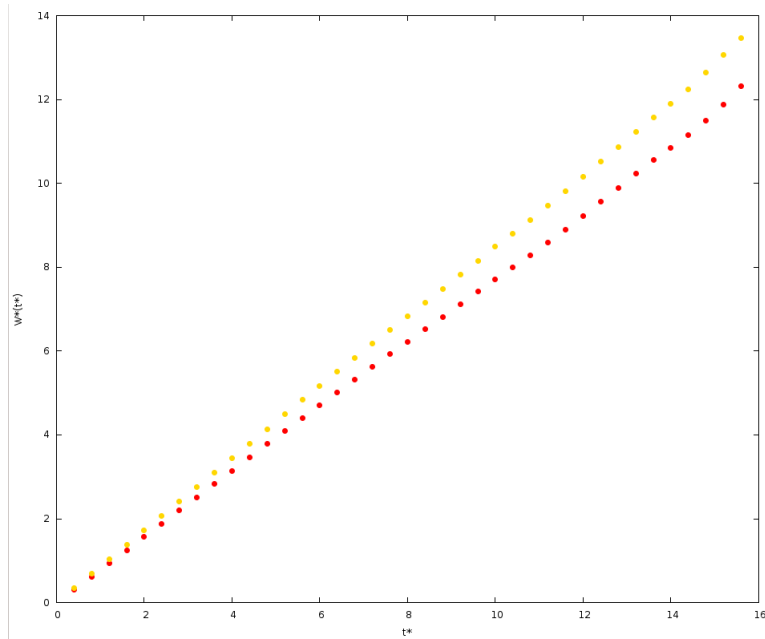


Figura 9: Imagen del desplazamiento cuadrático medio. La curva dorada corresponde al sistema 3 pero con el caso supercrítico  $T^* = 0.2$ , mientras que la curva roja corresponde al sistema 3.

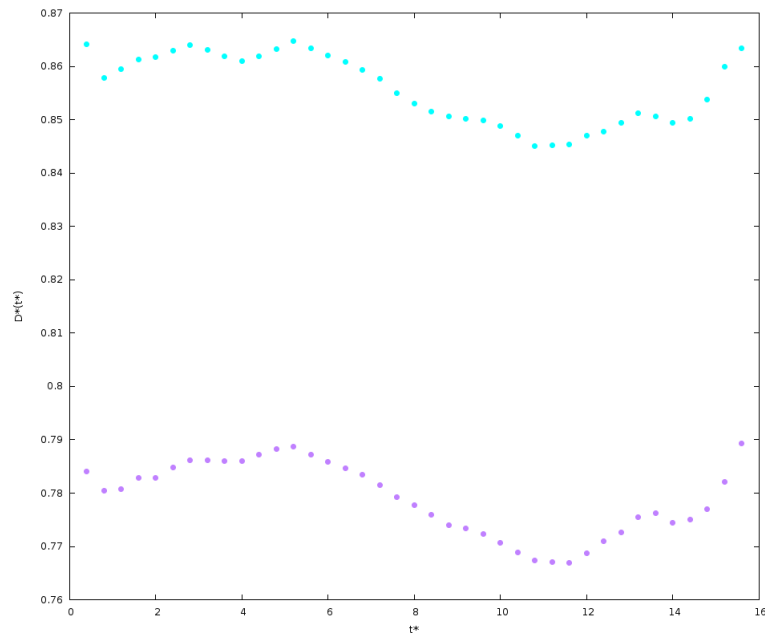


Figura 10: Coeficiente de difusión dependiente del tiempo. La curva morada corresponde al sistema 3 pero con el caso supercrítico  $T^* = 0.2$ , mientras que la curva cyan corresponde al sistema 3.



## Sistema 4

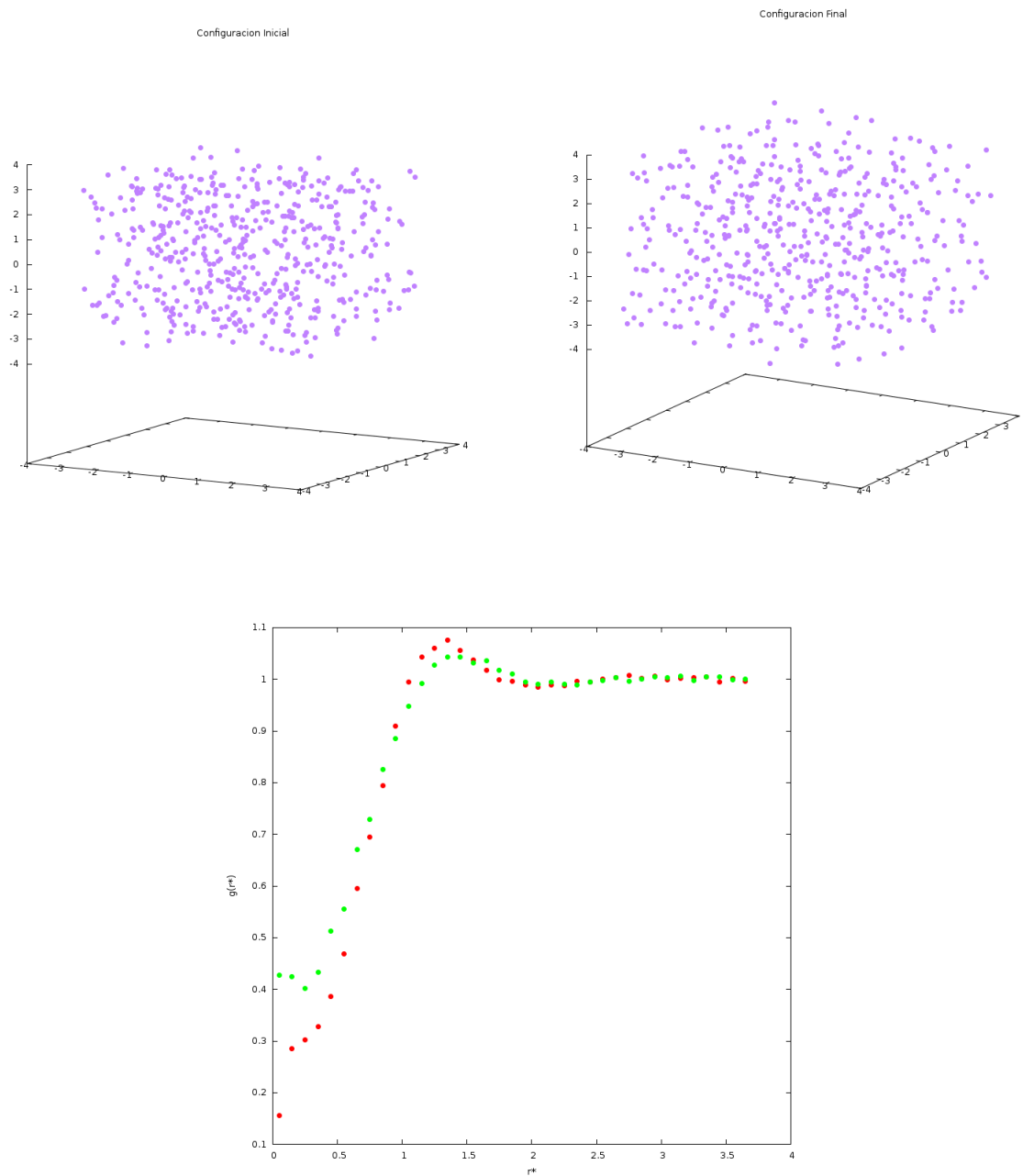


Figura 11: Imagen de la función de distribución radial. La curva verde corresponde al sistema 4 pero con el caso supercrítico  $T^* = 0.2$ , mientras que la curva roja corresponde al sistema 4.

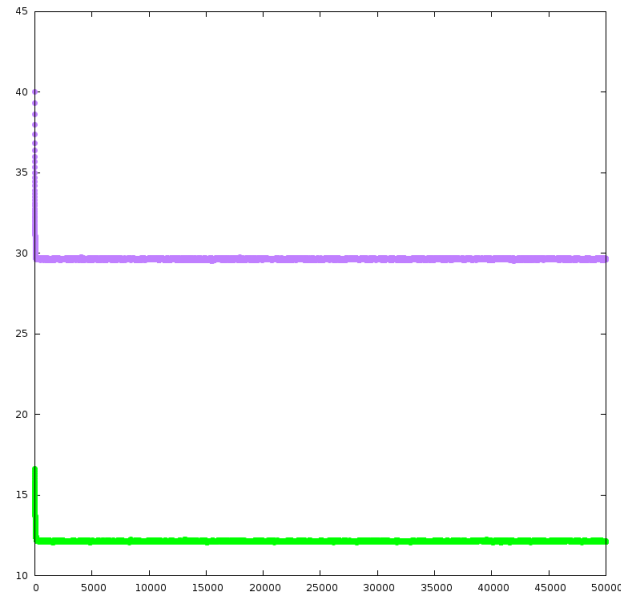


Figura 12: Imagen de la Termalización. La curva verde corresponde al sistema 4 pero con el caso supercrítico  $T^* = 0.2$ , mientras que la curva morada corresponde al sistema 4.

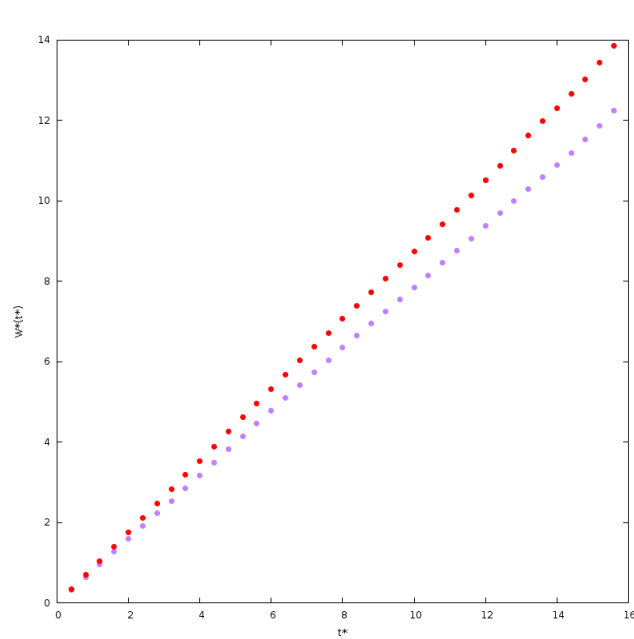


Figura 13: Imagen del desplazamiento cuadrático medio. La curva roja corresponde al sistema 4 pero con el caso supercrítico  $T^* = 0.2$ , mientras que la curva morada corresponde al sistema 3.

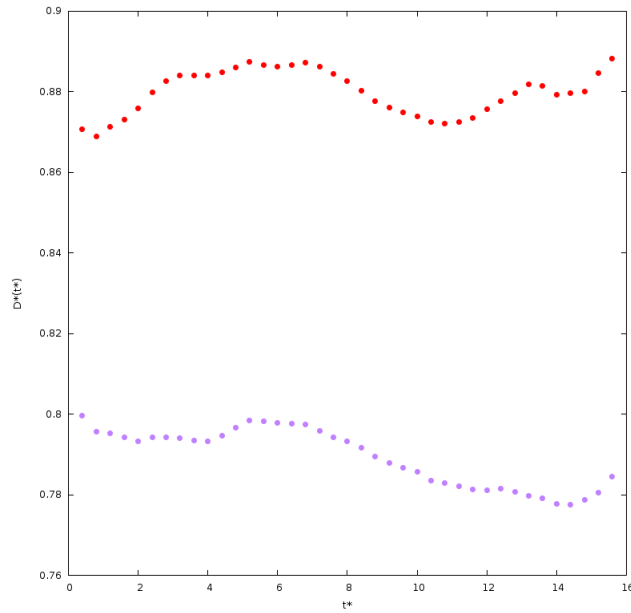


Figura 14: Coeficiente de difusión dependiente del tiempo. La curva roja corresponde al sistema 4 pero con el caso supercrítico  $T^* = 0.2$ , mientras que la curva morada corresponde al sistema 4.

## Conclusiones

Se pudo percibir el hecho de que el caso supercrítico modificaba de manera muy visible el comportamiento de las propiedades calculadas. Se captó que al modificarlo, estos cambios eran mas notables, este resultado nos sorprendió bastante, ya que esperabamos ver cambios mas abruptos al variar la concentración reducida.

## Referencias

- [1] Yeomans, Laura *Notas del curso*, Desarrollo experimental, semestre 2018-1.
- [2] Yeomans, Laura *Proyecto final Dinámica Browniana*, Desarrollo experimental, semestre 2018-1.