



DIAGRAMA DE FASES DE UMA MISTURA LENNARD-JONES COM SOLVENTE COMPOSTO POR PARTÍCULAS MUITO MENORES QUE O SOLUTO

Jéssica Thauany S. Gonçalves¹
Orientadora: Marcia Barbosa²

^{1,2}Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil
e-mail(s): ¹thauanygoncalves@hotmail.com , ²marcia.barbosa@ufrgs.br

Introdução

Fluidos representam um papel vital em nossa vida cotidiana. Circulam pelo nosso corpo, são responsáveis pelo clima. Nós respiramos e bebemos fluidos. E a compreensão do comportamento destas substâncias é de extrema importância. O objetivo deste trabalho é analisar e compreender, através de um modelo teórico, uma mistura de duas diferentes partículas, onde o soluto possui partículas muito maiores que as do solvente, as quais interagem entre si por um potencial contínuo, conhecido como potencial de Lennard Jones. Para isto utilizamos o método de simulação computacional de dinâmica molecular, primeiramente para um fluido simples no ensemble NVE (Número de Partículas, Volume e Energia constantes) para, posteriormente, partirmos para a análise, no ensemble NVT (Número de Partículas, Volume e Temperatura constantes), do comportamento das partículas componentes da mistura em função do tempo.

Metodologia

A simulação foi iniciada em uma caixa cúbica, com número de partículas, temperatura inicial, densidade e tempo de simulação definidos. Primeiro, investigou-se o comportamento de um fluido simples no ensemble NVE e foram feitas algumas análises de suas propriedades a fim de uma familiarização com o método de dinâmica molecular para posterior análise da mistura de interesse. Após o término da simulação o primeiro passo foi conferir se a energia total do sistema permanecia constante com o tempo para verificar a necessidade de ajustes antes da análise dos dados. O potencial de interação entre as moléculas analisadas foi o potencial de Lennard Jones, que é determinado pela seguinte equação:

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

Onde r^{12} é o termo repulsivo, o qual representa o princípio de exclusão de Pauli, que produz um efeito de curto alcance, consequência de orbitais eletrônicos que não se sobrepõem. Enquanto r^6 é chamado de termo atrativo pois descreve a força de atração a longo alcance (forças de Van der Waals).

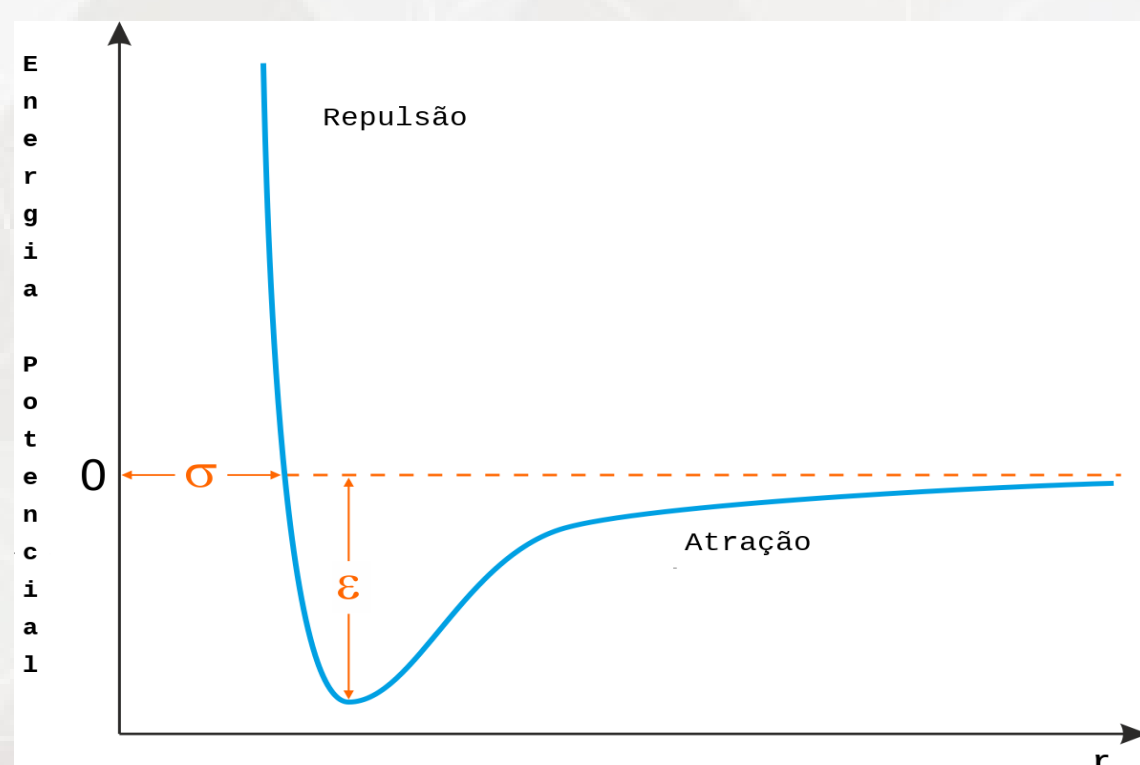


Figura 1 – Potencial de Lennard Jones

Apesar de sua simplicidade, o potencial de Lennard-Jones é uma ótima aproximação para a interação entre partículas de fluido; juntamente com a vantagem de sua implementação simples, se torna o modelo ideal para os propósitos desse trabalho.

Resultados e discussão

A energia total do sistema durante a simulação permaneceu constante, como mostrado abaixo:

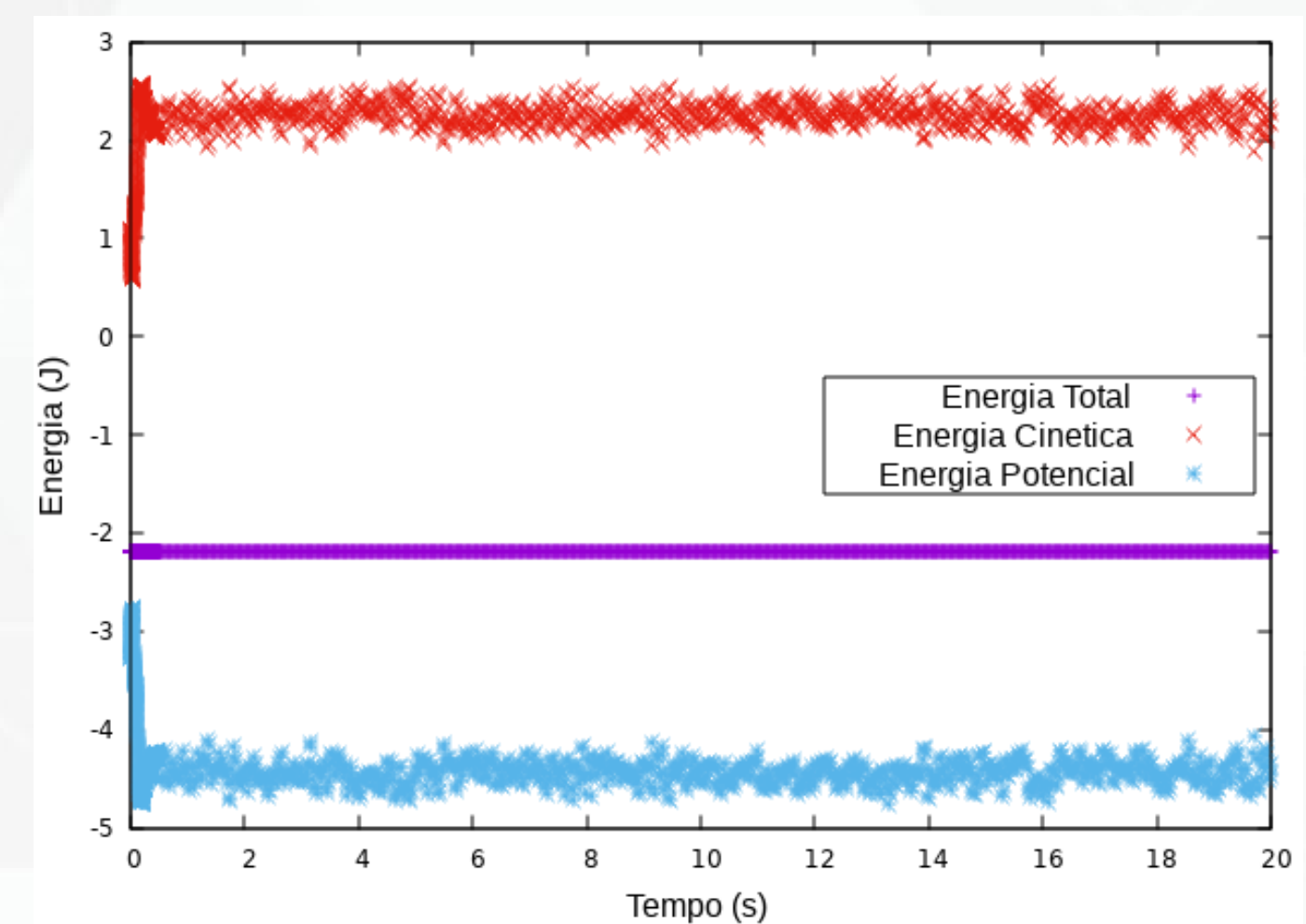


Figura 2 – Energia do sistema

Com isso, foi possível dar seguimento a análise dos dados obtidos durante a simulação. Então para o valor de energia do sistema, -2.8J, e para um fluido de densidade $0.8442 \text{ cm}^3/\text{m}^3$ foi encontrada a seguinte função radial:

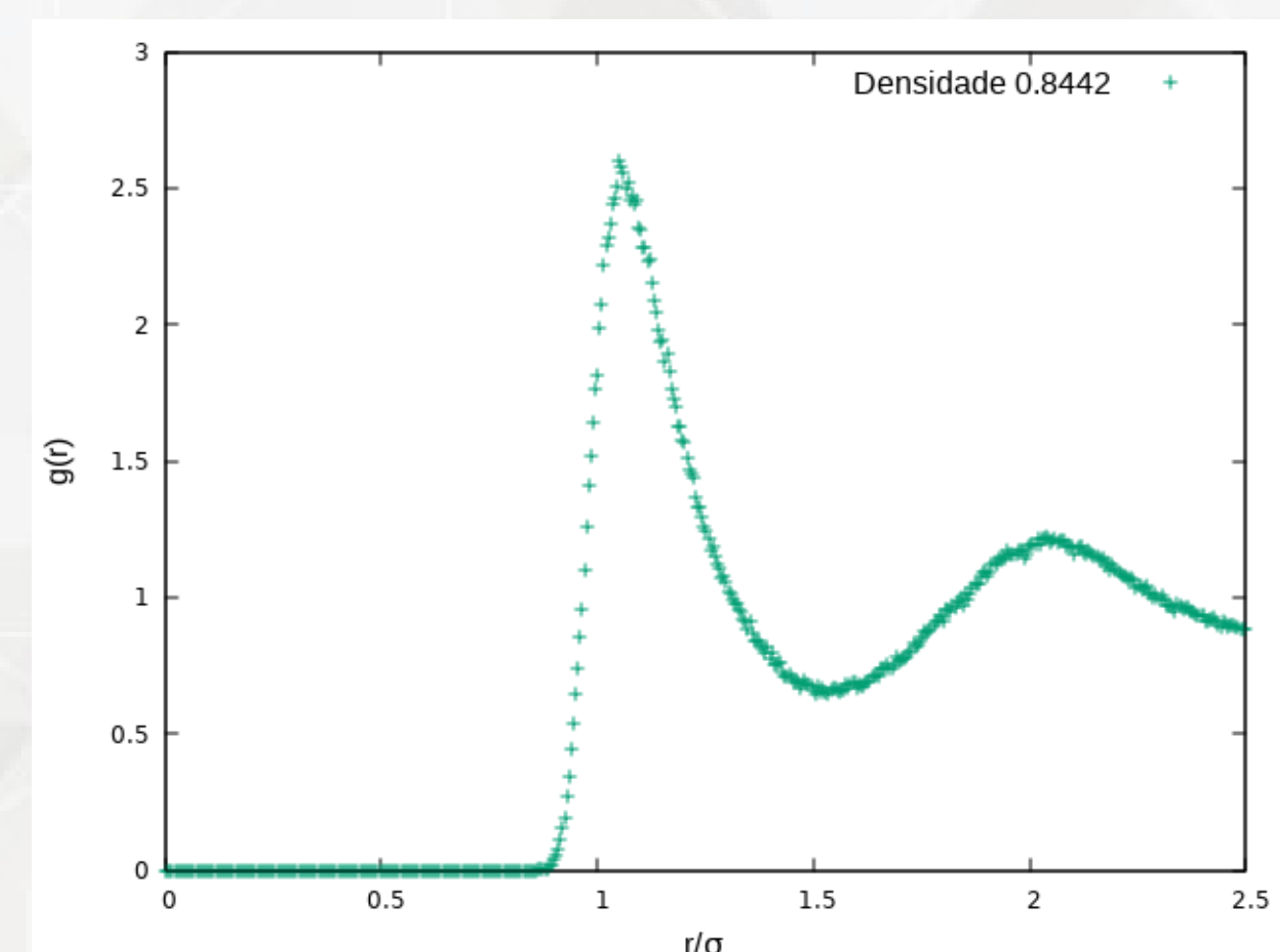


Figura 3 – Distribuição radial

A distribuição radial de um fluido descreve como a densidade da matéria circundante varia em função de um ponto distinto escolhido como origem, ela funciona como uma "densidade local".

Conclusões e Perspectivas

O método de dinâmica molecular se mostrou eficiente e satisfatório para a análise das misturas de interesse. As perspectivas futuras em relação a este trabalho são:

- Modificar o ensemble da simulação de NVE para NVT através da inclusão do termostato de Andersen no sistema;
- Simular para uma mistura de partículas;
- Analisar o comportamento destas misturas e construir um modelo teórico que nos permita compreendê-las melhor.