

Métodos perturbativos para el cálculo de la presión en sistemas que interactúan mediante el potencial de Yukawa

Jesús Algaba Fernández

Departamento de Física Aplicada, Universidad de Huelva, 21071 Huelva, España

El método tradicional empleado en simulación molecular para la determinación de la presión es la conocida ruta mecánica, que consiste en promediar sobre el colectivo en el que se lleva a cabo la simulación el virial del sistema [1,2]. Este método es de fácil implementación en sistemas que interactúan a través de potenciales continuos, pero presenta ciertas dificultades matemáticas cuando se aplica a sistemas en los que las interacciones presentan algún tipo de discontinuidad. En los últimos años se han desarrollado métodos alternativos, conocidos genéricamente como perturbativos [3], que permiten obtener la presión del sistema mediante cambios virtuales de volumen, pudiéndose calcular la presión haciendo uso de la definición mecánica de la presión (ruta mecánica o del virial) o de su definición termodinámica (ruta termodinámica) [4,5]. La implementación de los algoritmos que permiten obtener la presión por los métodos anteriormente descritos se pueden aplicar, no sólo a sistemas homogéneos, sino también, una vez generalizados, al caso en el que exista una inhomogeneidad en el sistema, como la presencia de una interfase fluido-fluido.

En este trabajo de investigación se estudian sistemas que interactúan a través de potencial de Yukawa. El estudio de estos sistemas presenta un interés doble. Desde el punto de vista práctico, se trata de un potencial con un alcance variable, lo que permite modelar sustancias que interactúan con diferentes rangos de potencial (interacciones dispersivas de corto alcance o electrostáticas apantalladas, etc.). Desde el punto de vista técnico, las interacciones repulsivas están descritas por un potencial de esfera dura (discontinuo), mientras que las atractivas lo están por un potencial continuo, lo que hace especialmente interesante el estudio de la presión mediante técnicas perturbativas, tanto en el caso de sistemas homogéneos como inhomogéneos.

El objetivo de este trabajo de investigación es la implementación del cálculo de la presión a través de las rutas mecánica y termodinámica haciendo uso de métodos perturbativos para el caso de sistemas homogéneos que interactúan con el potencial de Yukawa. Se obtendrá la ecuación de estado del sistema para diferentes rangos del potencial y los resultados se compararán con datos de la literatura [6]. Además, se generalizarán las expresiones obtenidas al caso inhomogéneo y se estudiarán algunas propiedades interfaciales líquido-vapor del sistema. En particular, se analizará el efecto de las correcciones de largo alcance, para diferentes rangos de interacción, sobre las propiedades interfaciales estudiadas. Para ello se generalizará la versión mejorada de las correcciones de largo alcance de Janecek [7], propuesta recientemente por MacDowell y Blas [8-10] para el potencial de Lennard-Jones, al caso del potencial de Yukawa. Los resultados obtenidos se compararán con datos de simulación tomados de la literatura [11].

REFERENCIAS

- [1] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford, 1987).
- [2] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation* (2° Ed., Academic, San Diego, 2002).
- [3] J. R. Errington y D. A. Kokfe, *J. Chem. Phys.* **127**, 174709 (2007).
- [4] E. de Miguel y G. Jackson, *J. Chem. Phys.* **125**, 164109 (2006).
- [5] E. de Miguel y G. Jackson, *Mol. Phys.* **104**, 3717 (2006).
- [6] E. Garnett, L. Mier-Y-Terán y F. Del Río, *Mol. Phys.* **97**, 597 (1999).
- [7] K. Janecek, *J. Phys. Chem. B* **110**, 6264 (2006).
- [8] L. G. MacDowell y F. J. Blas, *J. Chem. Phys.* **131**, 074705 (2009).
- [9] F. J. Blas, A. I. Moreno-Ventas Bravo, J. M. Míguez, M. M. Piñeiro y L. G. MacDowell, *J. Chem. Phys.* **137**, 084706 (2012).
- [10] F. J. Blas, A. I. Moreno-Ventas Bravo, J. Algaba, F. J. Martínez-Ruiz y L. G. MacDowell, *J. Chem. Phys.* **140**, 114705 (2014).
- [11] E. Lomba y N. G. Almarza, *J. Chem. Phys.* **100**, 8367 (1994).