

Simulació per Dinàmica de Langevin Generalitzada
de Sistemes de Partícules Interactives

Gemma Sesé i Castel

Departament de Física Fonamental
Facultat de Física Universitat de
Barcelona

SIMULACIÓ PER DINÀMICA DE LANGEVIN GENERALITZADA
DE SISTEMES DE PARTÍCULES INTERACTIVES

Memòria de la tesi realitzada per
Gemma Sesé i Castel, sota la direcció del
Dr. Joan A. Padró i Cárdenas, per a optar
al grau de Doctora en Ciències Físiques.

Barcelona, Abril del 1990.

C O N C L U S I O N S

- Les dificultats que es presenten a l'hora d'utilitzar l'Equació de Langevin Generalitzada (ELG) exacta per n partícules interactives en les simulacions per ordinador han justificat l'ús d'una ELG de caràcter fenomenològic en les simulacions de Dinàmica de Langevin Generalitzada (DLG).

- S'ha comprovat que la realització d'un test de la DLG, basat en la comparació dels resultats que se n'obtenen amb els provinents de la Dinàmica Molecular (DM), és un camí molt útil tant per millorar el mètode com per a aprofundir en les seves limitacions i possibilitats.

- S'ha posat de manifest la necessitat d'utilitzar funcions memòria efectives per tal d'obtenir una bona reproducció de les propietats dinàmiques per temps curts pel mètode de la DLG.

- S'ha proposat un mètode per a l'obtenció de funcions memòria efectives que parteix de la funció d'autocorrelació de velocitats $C(t)$ de les partícules de solut. També s'ha presentat un mètode semiempíric aproximat que dona bons resultats en els sistemes considerats.

- S'ha comprovat que, per líquids simples, existeixen potencials de força mitjana efectius i funcions memòria efectives que permeten obtenir els mateixos resultats per DLG que per DM per les funcions $g(r)$, $C(t)$ i $r^2(t)$, i també per al coeficient d'autodifusió D .

- S'ha analitzat la funció d'autocorrelació entre la velocitat i l'acceleració efectiva d'una partícula de solut ($\theta(t)$) a DLG i s'ha comprovat que juga un paper petit en el càlcul de les funcions memòria efectives. Això implica que la dinàmica d'una partícula per temps curts es veu poc afectada a la DLG per les interaccions amb les altres partícules i, en conseqüència, pel potencial d'interacció utilitzat.

- Les funcions memòria calculades s'han ajustat a desenvolupaments de Mori truncats a diferents nivells, i s'ha comprovat que com més complexa és la funció memòria, més coeficients de Mori són necessaris per a descriure-la. Així mateix, amb el nombre de coeficients de Mori augmenten també els requeriments de temps de càlcul a les simulacions de DLG en les quals aquests desenvolupaments s'utilitzen. En conseqüència, és interessant estudiar altres algorismes d'integració de l'ELG que no requereixin desenvolupaments de Mori per a les funcions memòria.

- S'ha constatat que la simulació és una eina insubstituïble en l'anàlisi dels models teòrics representats per les equacions de Langevin, ja que permet obtenir les forces estocàstiques que hi apareixen i que, com que no tenen una existència "real", no són mesurables experimentalment.

- S'han calculat en simulacions de DM les forces estocàstiques que apareixen a l'ELG, tant d'una com de n partícules interactives. S'ha comprovat que aquestes forces satisfan totes les propietats que els són característiques des d'un punt de vista teòric.

- La distribució estadística de les forces estocàstiques presenta algunes diferències quantitatives respecte a una distribució gaussiana. Ara bé, tot i que en les nostres simulacions es parteix d'una distribució d'aquest tipus, no s'ha detectat cap problema que pugui associar-se a la no gaussianitat d'aquestes forces.

- Pels sistemes estudiats, s'ha comprovat que existeixen algunes diferències entre la funció de correlació de les forces estocàstiques sobre una partícula de massa infinita i la de correlació d'aquestes forces si la partícula es troba en moviment. Això ens porta a concloure que, tot i que per ions en aigua les anteriors funcions presenten una gran similitud, cal anar en compte a l'hora d'extendre la hipòtesi de la seva igualtat a tot tipus de sistemes.

- S'ha comprovat que la DLG dóna resultats prou realistes en el comportament microscòpic de cada element d'un subconjunt de partícules interactives, si en aquestes simulacions s'utilitzen com a dades d'entrada les funcions memòria efectives i els potencials d'interacció efectius proposats. I això és cert no només per la $g(r)$, la $C(t)$ i la $r^2(t)$, sinó també per altres funcions com la $\theta(t)$, la $G^s(r,t)$ i la $G^d(r,t)$.

- S'ha constatat l'existència de serioses discrepàncies entre els resultats aportats per la DM i els obtinguts a través de la DLG per les funcions de correlació de velocitats creuades entre partícules diferents. Això és natural ja que aquestes funcions indiquen com és el comportament col·lectiu del sistema, fortament depenent de les interaccions hidrodinàmiques, que no s'han considerat en les nostres simulacions.