Efecto del termostato de Langevin en los coeficientes de transporte

CONICET

UNIVERSIDAD NACIONAL de MAR DEL PLATA

IFIMAR

A. Ales, J. I. Cerato, M. Hoyuelos y L. Marchioni

Fenómenos de transportes

Difusion (D)

Transporte de masa

Conductividad térmica (λ)

Transporte de energía

Viscosidad (η)

Transporte de momentum

Cantidades adimensionadas

$$\rho^* = \rho\sigma^3$$

$$t^* = t\,\frac{1}{\sigma}\sqrt{\frac{\epsilon}{m}}$$

$$T^* = T\,\frac{k_B}{\epsilon}$$

$$D^* = D\,\frac{1}{\sigma}\sqrt{\frac{m}{\epsilon}}$$

$$\lambda^* = \frac{\lambda}{k_B}\sigma^2\sqrt{\frac{\epsilon}{m}}$$

$$\eta^* = \eta\sigma^2\sqrt{\frac{1}{\epsilon m}}$$

Chapman-Enskog

Difusion (D)

$$D_B^* = \frac{3\sqrt{T^*/\pi}}{8\,\rho^*\Omega^*_{(1,1)}}$$

Conductividad térmica (λ)

$$\lambda_B^* = \frac{75\sqrt{T^*/\pi}}{64\,\Omega^*_{(2,2)}}$$

Viscosidad (η)

$$\eta_B^* = \frac{5\sqrt{T^*/\pi}}{16\,\Omega^*_{(2,2)}}$$

Integrales de colisión $\Omega^*_{(l,s)}$

- Dependen del potencial de interacción de las partículas y de la temperatura

- Para adimensionar

$$\Omega^*_{(l,s)} = \frac{\Omega_{(l,s)}}{\Omega^{HS}_{(l,s)}}$$

- Por lo tanto $\Omega^*_{(l,s)} = 1$ en el caso de esferas duras

- Y se calcula numéricamente para otros potenciales

Corrientes de Langevin

Difusion (D)

$$D_L^* = T^* t_a^*$$

Conductividad térmica (λ)

$$\lambda_L^* = \frac{\rho^* T^* t_a^*}{2}$$

Viscosidad (η)

$$\eta_L^* = \frac{\rho^* T^* t_a^*}{2}$$

t_a^* es el tiempo de amortiguamiento del sistema, esta relacionado con la intensidad del ruido.

Leyes de Ohm generalizadas

$$V = I\,R$$

Difusion (D)

$$J = -D\,\frac{d\varphi}{dx}$$

Conductividad térmica (λ)

$$Q = \lambda\frac{dT}{dx}$$

Viscosidad (η)

$$\tau_{xy} = \eta\frac{du}{dy}$$

Leyes de Ohm generalizadas

Difusion (D)

$$I = \frac{1}{R} V$$

$$J = D\left(-\frac{d\varphi}{dx}\right)$$

Conductividad térmica (λ)

$$I = \frac{1}{R} V$$

$$Q = \lambda \frac{dT}{dx}$$

Viscosidad (η)

$$I = \frac{1}{R} V$$

$$\tau_{xy} = \eta \frac{du}{dy}$$

Leyes de Ohm generalizadas

Difusion (D)

$$R = \frac{1}{D}$$

Conductividad térmica (λ)

$$R = \frac{1}{\lambda}$$

Viscosidad (η)

$$R = \frac{1}{\eta}$$

Sistemas mixtos

- ¿Qué pasa cuando tenemos partículas interactuando con un potencial y activamos el termostato de Langevin?
- ¿Qué pasa con los coeficientes de transporte en ese caso?

Las partículas del sistema estarán bajo ambos efectos, por lo que las "resistencias" del sistema deberían de considerarse en serie

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_B} + \frac{1}{C_L}$$

Pudiendo ser C la difusión, la viscosidad o la conductividad térmica

Sistemas mixtos

Difusión (D)

$$D^* = \frac{T^* t_a^*}{\frac{3}{8}\rho^* t_a^* \Omega^*_{(1,1)}\sqrt{\pi T^*}+1}$$

Conductividad térmica (λ)

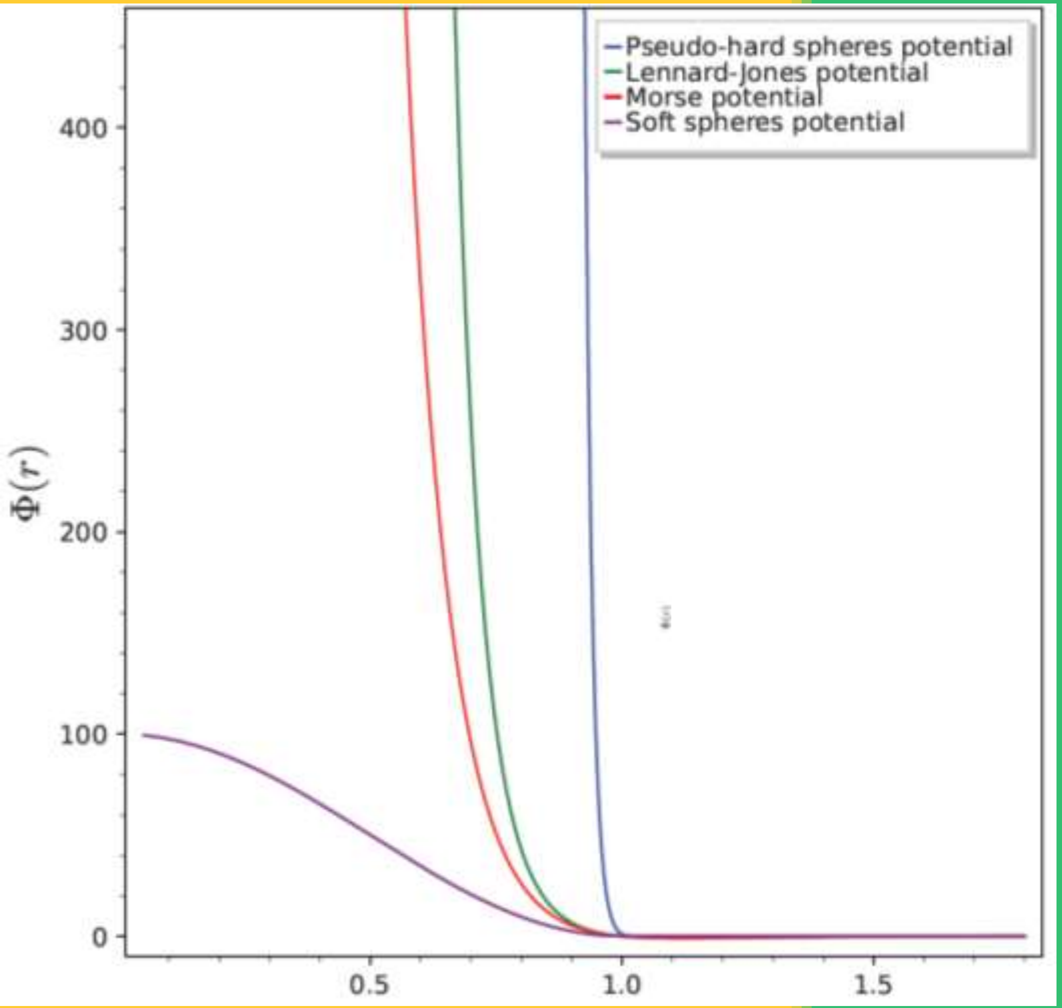
$$\lambda^* = \frac{T^* t_a^* \rho^*}{\frac{64}{75}\rho^* t_a^* \Omega^*_{(2,2)}\sqrt{\pi T^*}+2}$$

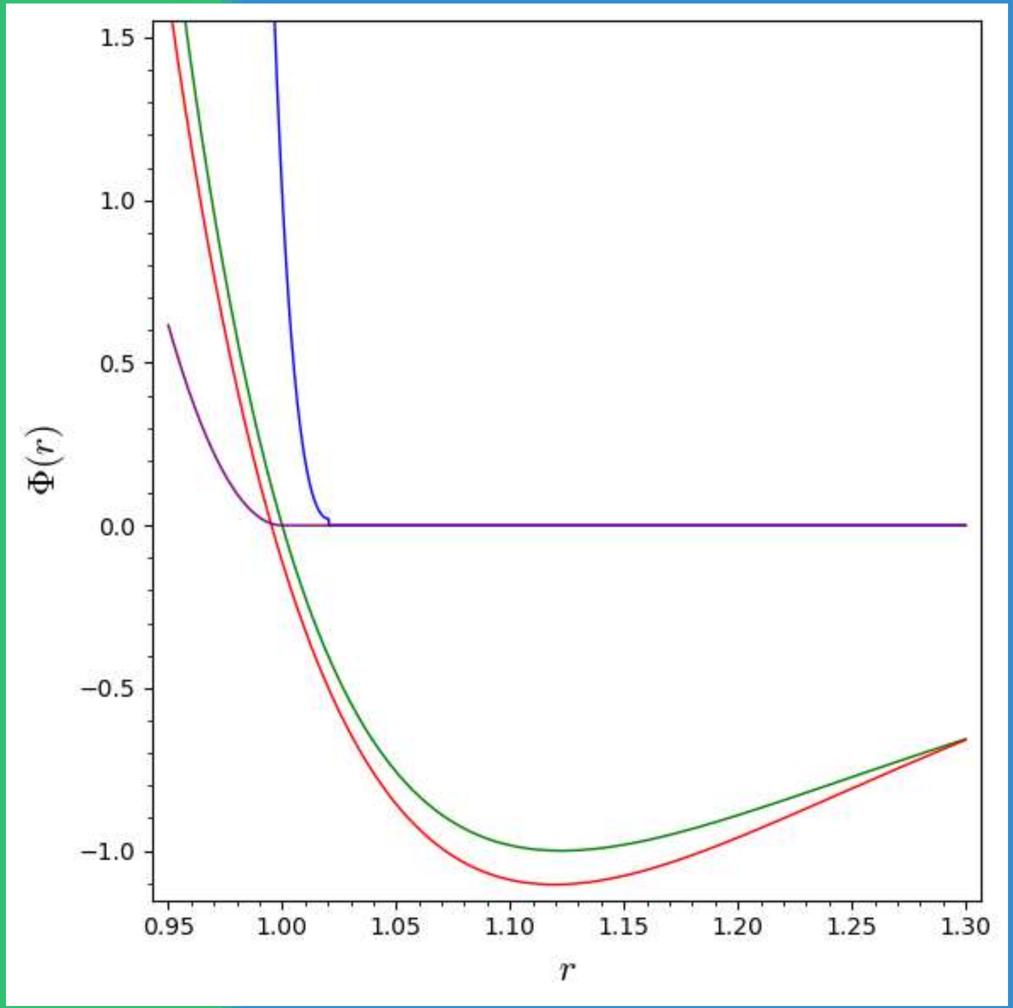
Viscosidad (η)

$$\eta^* = \frac{T^* t_a^* \rho^*}{\frac{16}{5}\rho^* t_a^* \Omega^*_{(1,1)}\sqrt{\pi T^*}+2}$$

El t_a asociado al termostato de langevin sirve como parámetro de control, modulando la influencia del termostato en los coeficientes de transporte

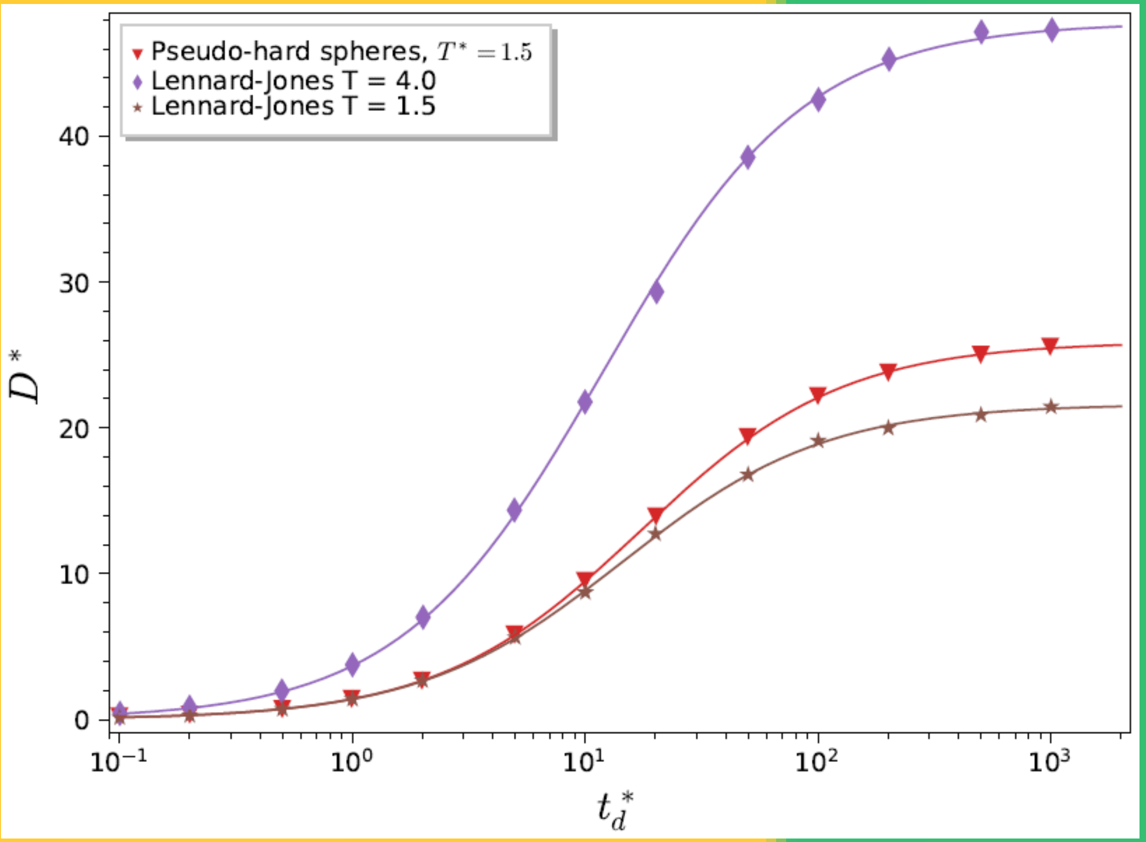
Potenciales

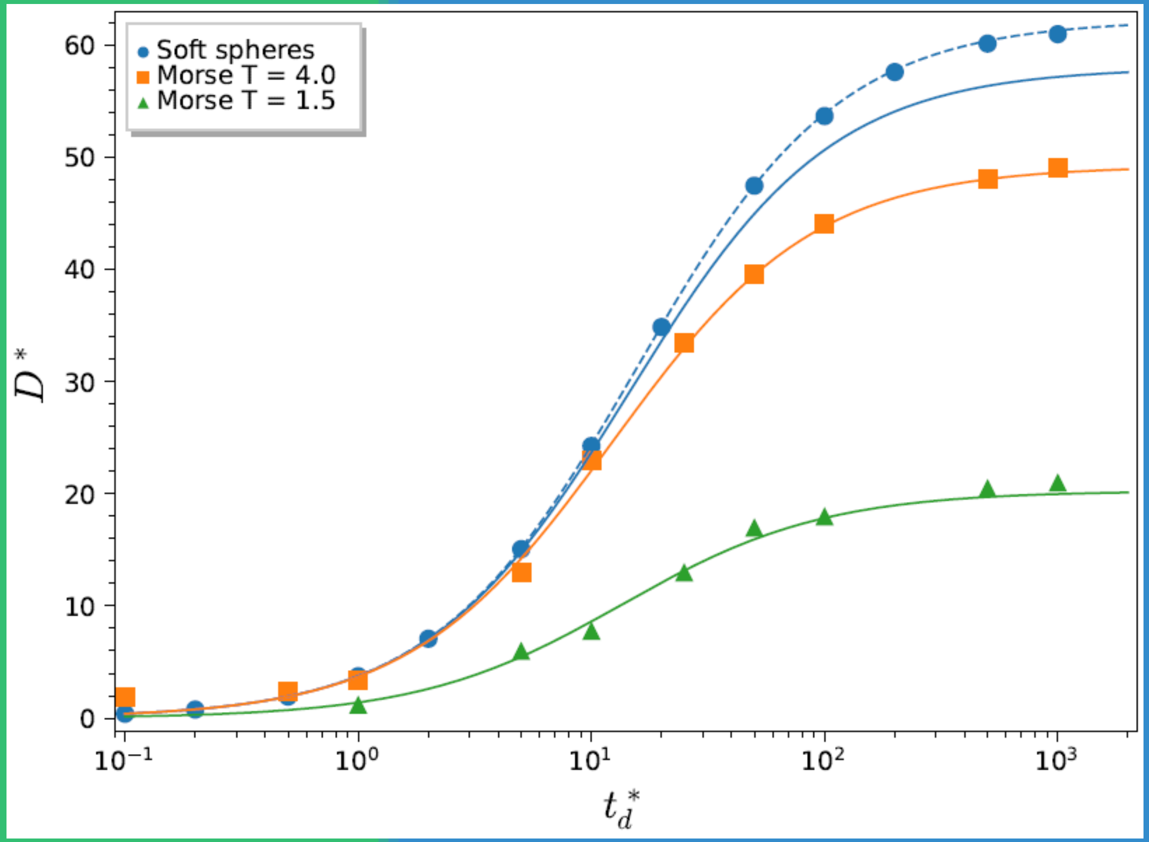




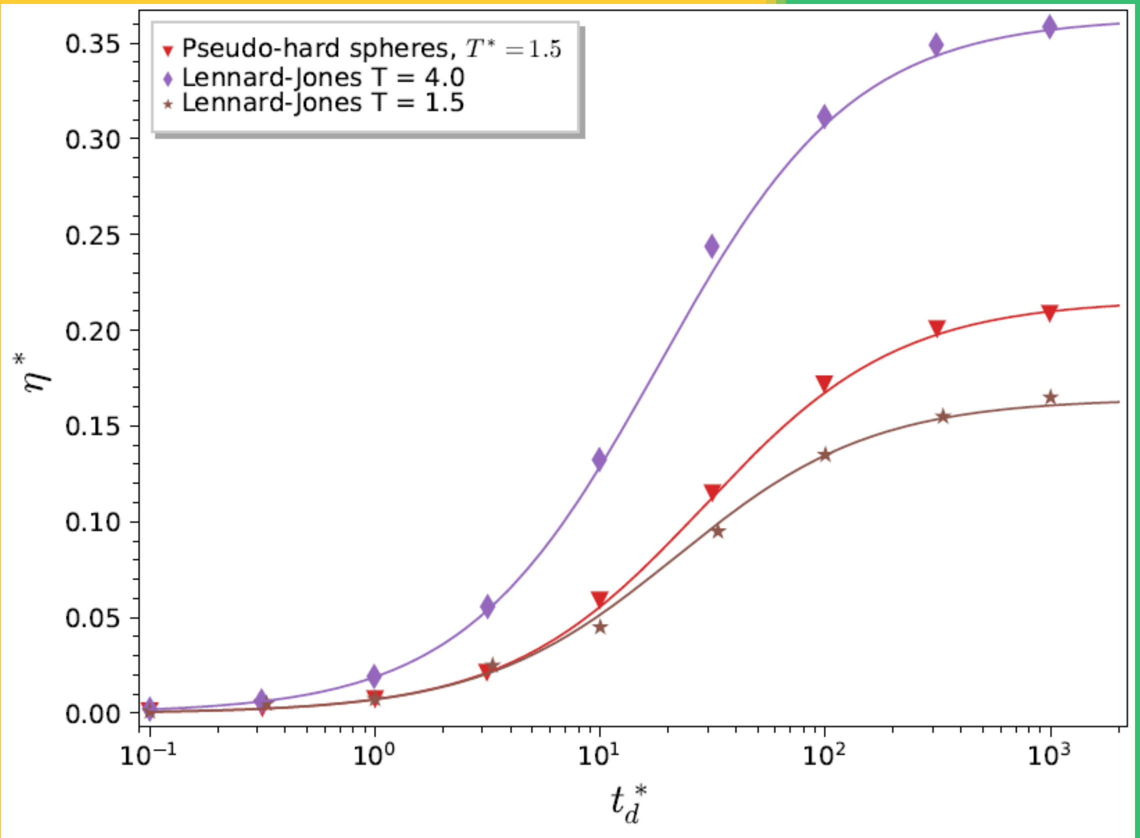
Se tomaron potenciales de núcleo duro y de núcleo blando.
Algunos son puramente repulsivos y otros tienen componentes atractivas y repulsivas combinadas

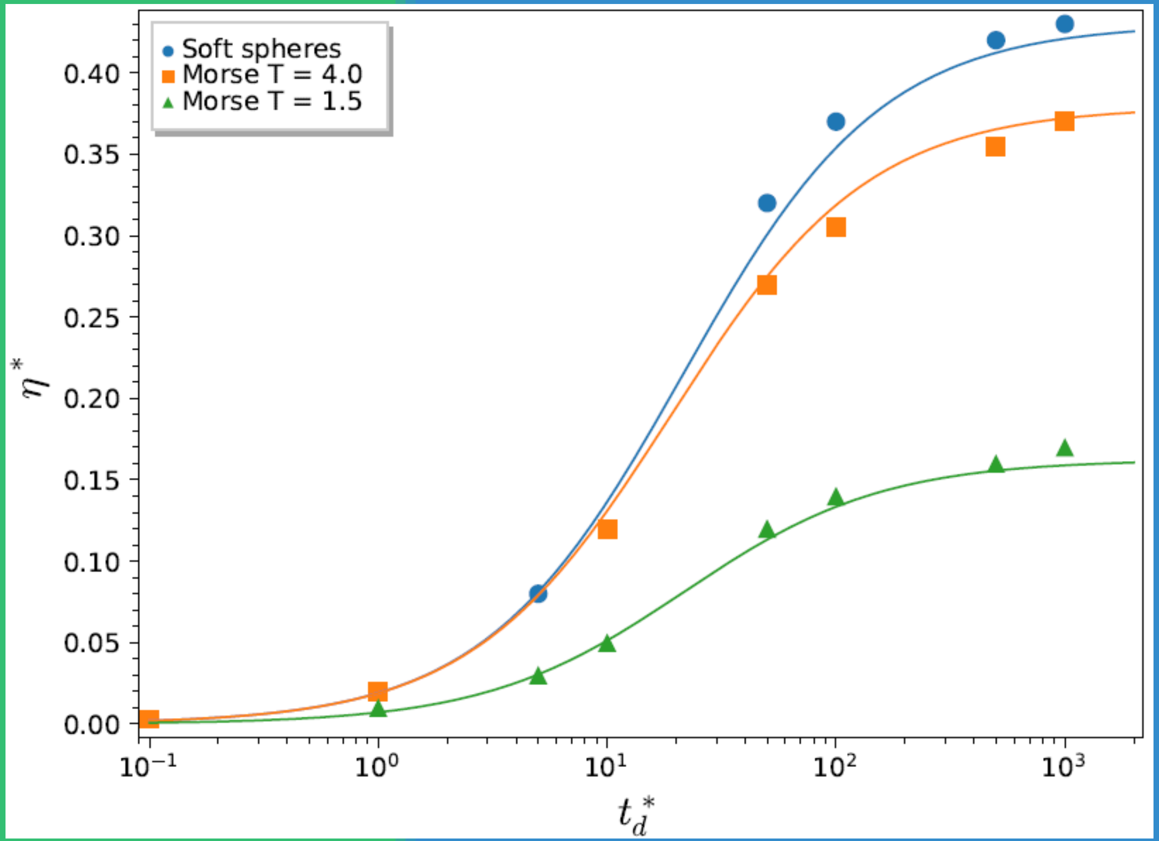
Resultados (Difusión)



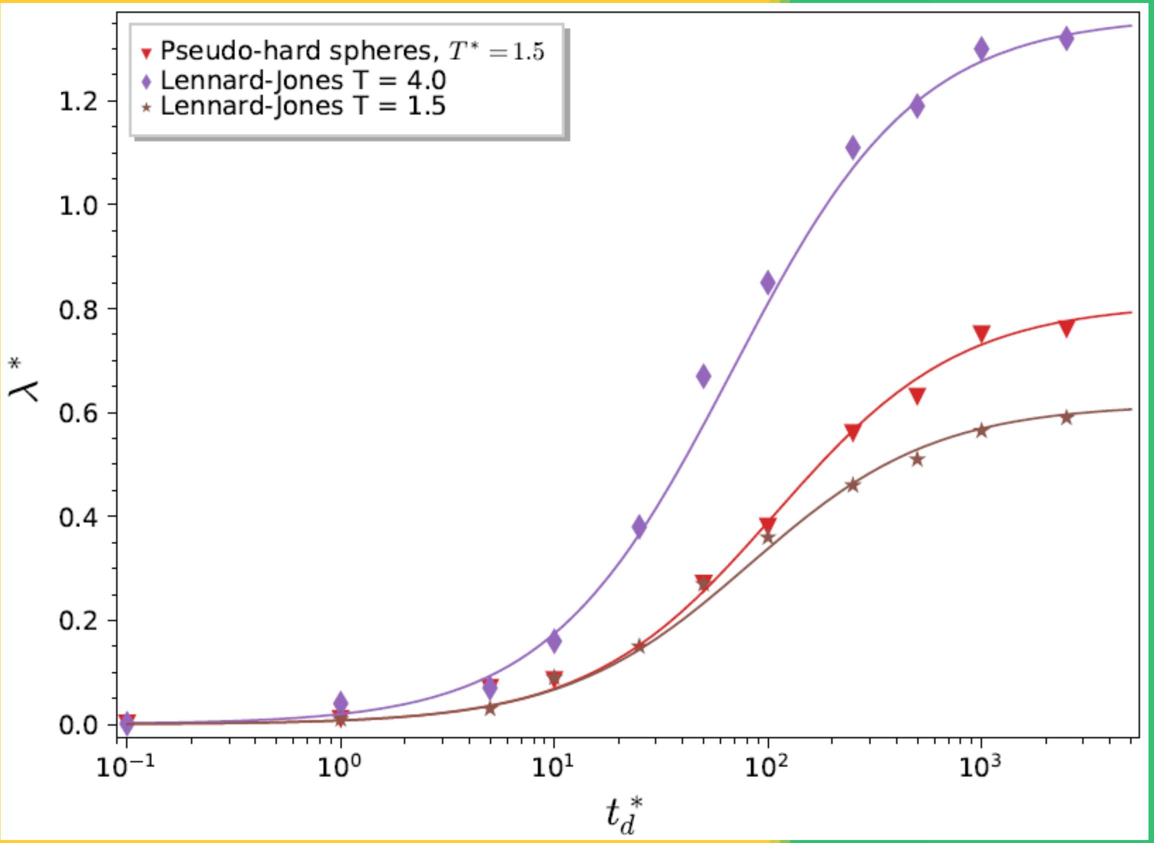


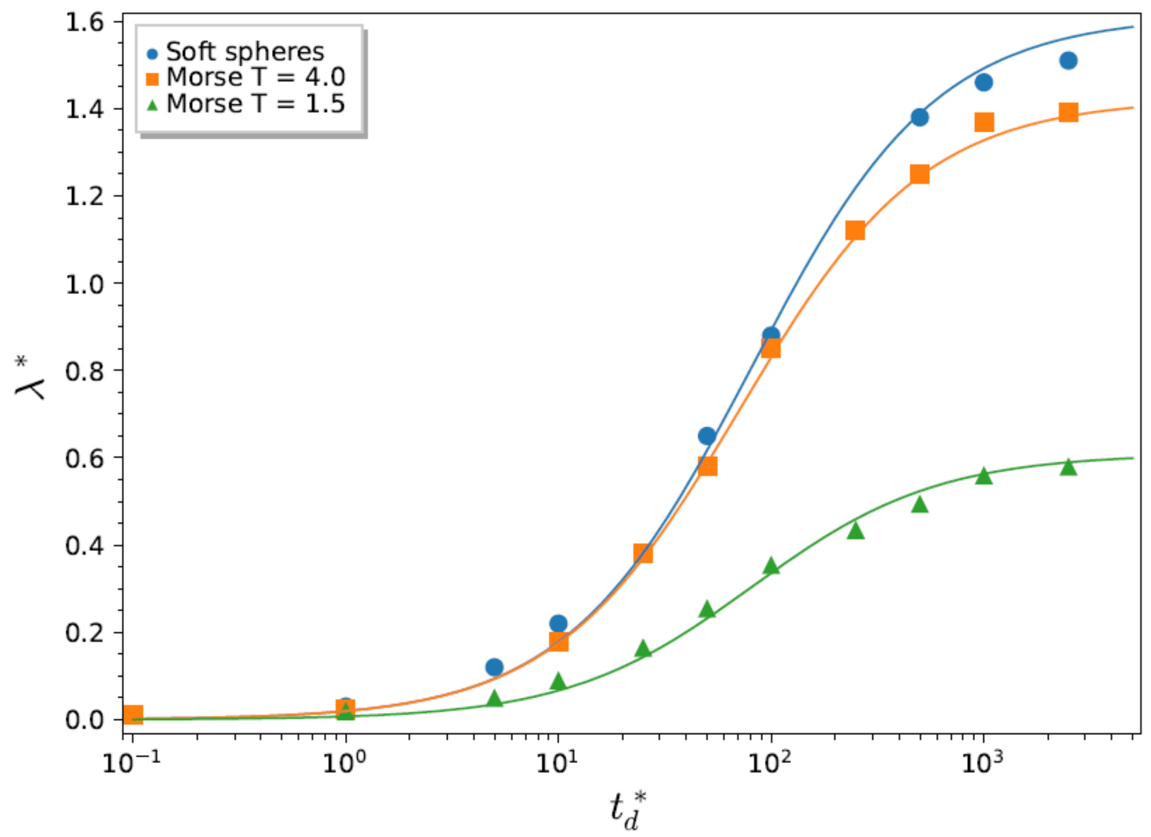
Resultados (Viscosidad)





Resultados (Conductividad térmica)





Conclusiones

Se exploro una amplia gama de t_a y observamos consistencia entre los resultados numéricos y las predicciones teóricas. Esta consistencia se ve también para distintos potenciales.

De acuerdo a lo observado los coeficientes de gases diluidos con un termostato de Langevin pueden caracterizarse y predecirse sistemáticamente.

Con este trabajo presente, ahora se puede eliminar la influencia del termostato de Langevin de futuros cálculos de coeficientes de transporte.

¿Preguntas?