

Estudio de la coexistencia líquido-vapor de dímeros con interacción tipo pozo cuadrado mediante simulación numérica.

Francisco Sastre^{1,2}, and Felipe J. Blas¹

¹ Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional, CIQSO-Centro de Investigación en Química Sostenible y Departamento de Ciencias Integradas, Universidad de Huelva, 21006 Huelva

² Departamento de Ingeniería Física de la División de Ciencias e Ingenierías, Universidad de Guanajuato, AP E-143, C.P. 37150, León, Guanajuato, México

El estudio de sistemas compuestos por dímeros que interactúan mediante potenciales tipo pozo cuadrado [1] revierte gran interés ya que estos sistemas continen las características esenciales que se espera de fluidos reales no polares. Cada dímero consiste de dos esferas impenetrables de diámetro σ unidas tangencialmente con un potencial de interacción entre los segmentos dada por

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & \text{if } r \leq \sigma \\ -\epsilon & \text{if } \sigma < r \leq \lambda\sigma \\ 0 & \text{if } r > \lambda\sigma \end{cases}, \quad (1)$$

en donde ϵ es la energía de interacción y λ es el alcance de la atracción.

En este trabajo determinamos el diagrama de coexistencia líquido-vapor y el punto crítico para alcance $\lambda = 1.5\sigma$ mediante dos técnicas de simulación numérica:

- En la vecindad del punto crítico usamos un nuevo algoritmo que permite evaluar directamente el potencial químico basado en razones de transición, ver Fig. 1, y
- Dinámica molecular, para valores de temperatura alejadas de la región crítica.

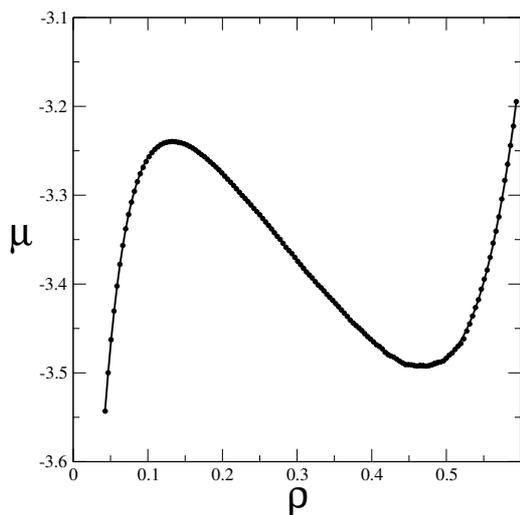


Fig. 1. Potencial químico en función de la densidad para un sistema de dímeros de alcance $\lambda = 1.5\sigma$ para una caja de simulación $L = 8\sigma$ y temperatura reducida $T = 1.49$. Los puntos son los resultados de la simulación y la línea continua es un ajuste polinomial de noveno grado.

El método de razones de transición ha sido propuesto recientemente por F. Sastre [2] y ha permitido evaluar el punto

crítico de monómeros con interacción tipo pozo cuadrado con gran precisión.

Las simulaciones a bajas temperaturas se han llevado a cabo mediante la técnica de coexistencia directa haciendo uso del paquete GROMACS (versión 4.6) [3], en combinación con el potencial de pozo cuadrado continuo propuesto recientemente por Zerón y colaboradores [4].

Comparamos nuestros resultados con simulaciones numéricas obtenidas mediante aproximaciones de reweighting [5].

-
- [1] A. Yethiraj and C. Hall, *Square-well diatomics: bulk equation of state, density profiles near walls, virial coefficients and coexistence properties*, Mol. Phys. **72**, 619 (1991).
 - [2] F. Sastre, *Critical temperature determination on a square-well fluid using an adaptation of the microcanonical-ensemble computer simulation method*, Mol. Phys. **118**, e1593534 (2020).
 - [3] D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, G. Groenhof, A. E. Mark, and H. J. Berendsen, *GROMACS: Fast, Flexible, and Free*, J. Comput. Chem., **26**, 1701 (2005).
 - [4] I. M. Zerón, C. Vega, and A. L. Benavides, *Continuous version of a square-well potential of variable range and its application in molecular dynamics simulations*, Mol. Phys. **116**, 3355 (2018).
 - [5] L. Li, K. Tang, L. Wu, W. Zhao and J. Cai, *Monte Carlo Simulation of vapor-liquid equilibrium and critical asymmetry of square-well dimer fluid*, J. Chem. Phys. **136**, 214508 (2012).