

# Semana 1: Ciencia computacional de materiales, introducción a la dinámica molecular

Camilo Espejo<sup>1</sup>

camilo.espejo@utadeo.edu.co

<sup>1</sup>Maestría en Modelado y Simulación

Departamento de Ciencias Básicas, Univerisdad Jorge Tadeo Lozano

1 de agosto de 2015



Curso optativo 1:  
M&S de Sistemas Naturales

# Sumario

## Modelamiento físico de materiales

Flowchart del desarrollo de un modelo de un material

## Estructura de la materia e interacciones

Aproximación de Born-Oppenheimer

## Modelo cinético del gas ideal

# Modelamiento físico de materiales

Basado en *Mat. Sci. Tech.*, **8**, 102 (1992).

- ▶ Modelos físicos Vs. modelos fenomenológicos.

# Modelamiento físico de materiales

Basado en *Mat. Sci. Tech.*, **8**, 102 (1992).

- ▶ Modelos físicos Vs. modelos fenomenológicos.  
Basados en principios o leyes establecidas de la física y la química, tienen poder **predictivo** Vs. Ajuste matemático aproximado a un conjunto de mediciones experimentales, sin poder de **predicción**.

# Modelamiento físico de materiales

Basado en *Mat. Sci. Tech.*, **8**, 102 (1992).

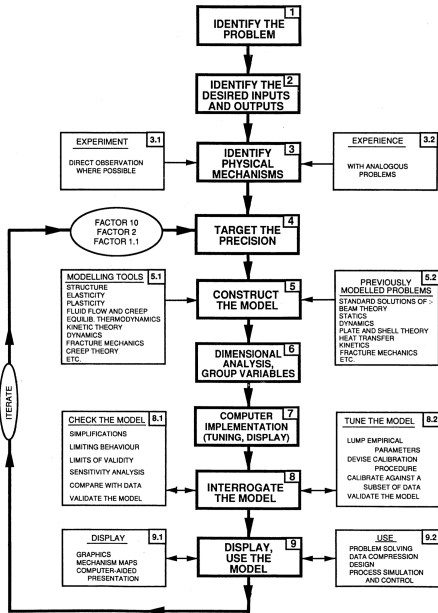
- ▶ Modelos físicos Vs. modelos fenomenológicos.  
Basados en principios o leyes establecidas de la física y la química, tienen poder **predictivo** Vs. Ajuste matemático aproximado a un conjunto de mediciones experimentales, sin poder de **predicción**.
- ▶ Modelos Estáticos Vs. modelos dinámicos.

# Desarrollo de un modelo de un material

Basado en *Mat. Sci. Tech.*, 8, 102 (1997)

UNIT	SCALE	MECHANICS
STRUCTURED - STRUCTURE	$10^4$ m	STRUCTURAL MECHANICS
SIMPLE STRUCTURE	$10^2$	DAMAGE / FRACTURE MECHANICS
COMPONENT	1m	CONTINUUM MECHANICS
GRAIN	$10^{-2}$ m	CRYSTAL PLASTICITY
DISLOCATION POPULATION	$10^{-4}$ m	MICRO - MECHANICS
SINGLE DISLOCATION	$10^{-6}$ m	DISLOCATION MECHANICS
ATOMIC	$10^{-8}$ m	ATOMISTICS : LATTICE POTENTIALS
ELECTRONIC - ORBITAL	$10^{-10}$ m	E - ORBITAL MECHANICS
	$10^{-12}$ m	
	$10^{-14}$ m	
NUCLEAR	$10^{-16}$ m	NUCLEAR PHYSICS

15 Hierarchy of structural scales (see also Refs. 11 and 37)



# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional →

# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional → Masa



# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional → **Masa**
- ▶ I. Electromagnética →

# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional → **Masa**
- ▶ I. Electromagnética → **Carga**

# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional → **Masa**
- ▶ I. Electromagnética → **Carga**

$d \sim 10^{-14}$  m:

- ▶ I. Nuclear Fuerte →

# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional → **Masa**
- ▶ I. Electromagnética → **Carga**

$d \sim 10^{-14}$  m:

- ▶ I. Nuclear Fuerte → **Color, Sabor**

# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional → **Masa**
- ▶ I. Electromagnética → **Carga**

$d \sim 10^{-14}$  m:

- ▶ I. Nuclear Fuerte → **Color, Sabor**
- ▶ I. Nuclear Débil →

# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional → Masa
- ▶ I. Electromagnética → Carga

$d \sim 10^{-14}$  m:

- ▶ I. Nuclear Fuerte → Color, Sabor
- ▶ I. Nuclear Débil → Carga débil

# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional → Masa
- ▶ I. Electromagnética → Carga

$d \sim 10^{-14}$  m:

- ▶ I. Nuclear Fuerte → Color, Sabor
- ▶ I. Nuclear Débil → Carga débil

Leyes de fuerza + Leyes de Newton → descripción del Movimiento

$$\vec{F} = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2}$$

# Estructura de la materia e interacciones

- ▶ I. Gravitacional → Masa
- ▶ I. Electromagnética → Carga

$d \sim 10^{-14}$  m:

- ▶ I. Nuclear Fuerte → Color, Sabor
- ▶ I. Nuclear Débil → Carga débil

Leyes de fuerza + Leyes de Newton → descripción del Movimiento

$$\vec{F} = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2}$$

Ejemplo: Modelo del gas ideal



# Aproximación de Born-Oppenhemier

- ▶  $m_e \ll m_p \rightarrow$  Desacople de los movimientos nucleares de los electrónicos.
- ▶ Potencial de Lennard-Jones:

$$\Phi_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

# Outline

## Modelamiento físico de materiales

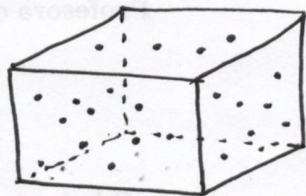
Flowchart del desarrollo de un modelo de un material

## Estructura de la materia e interacciones

Aproximación de Born-Oppenheimer

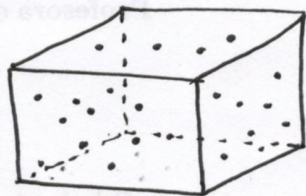
## Modelo cinético del gas ideal

# Modelo cinético del gas ideal



$N, V$

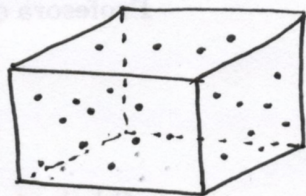
# Modelo cinético del gas ideal



$N, V$

► Sistema cerrado:

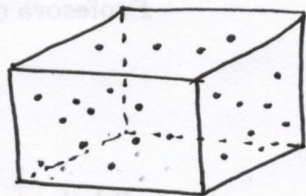
# Modelo cinético del gas ideal



$N, V$

- ▶ Sistema cerrado: No salen ni entran partículas.
- ▶ Sistema aislado:

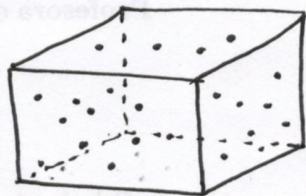
# Modelo cinético del gas ideal



$N, V$

- ▶ Sistema cerrado: No salen ni entran partículas.
- ▶ Sistema aislado: No hay interacciones con partículas del exterior.
- ▶ No hay interacciones entre las partículas

# Modelo cinético del gas ideal

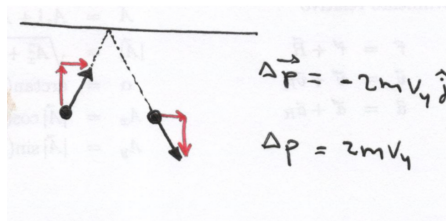
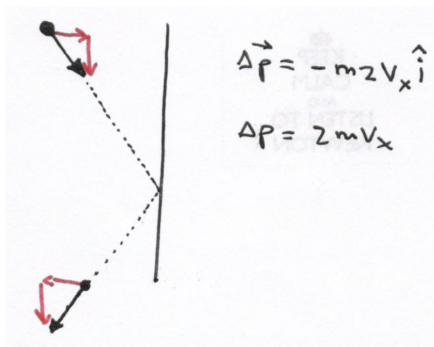


$N, V$

- ▶ Sistema cerrado: No salen ni entran partículas.
- ▶ Sistema aislado: No hay interacciones con partículas del exterior.
- ▶ No hay interacciones entre las partículas
- ▶ Energía interna:  $\sum_i E_{ki}$

# Modelo cinético del gas ideal

Intercambio de momentum entre las paredes y las partículas



$$\Delta \vec{p} = m\vec{v}_f - m\vec{v}_i = m(\vec{v}_f - \vec{v}_i)$$

$$\Delta \vec{p} = m \left( (-v_x \hat{i} + v_y \hat{j}) - (v_x \hat{i} + v_y \hat{j}) \right)$$

$$\Delta \vec{p} = -m(2v_x \hat{i})$$



# Modelo cinético del gas ideal

Presión sobre las paredes del recipiente

Agrupemos las moléculas según sus velocidades en  $x$ :

$$N = N_1 + N_2 + N_3 + \cdots + N_i + \cdots$$

# Modelo cinético del gas ideal

## Presión sobre las paredes del recipiente

Agrupemos las moléculas según sus velocidades en  $x$ :

$$N = N_1 + N_2 + N_3 + \cdots + N_i + \cdots \sum_i N_i$$



# Modelo cinético del gas ideal

## Presión sobre las paredes del recipiente

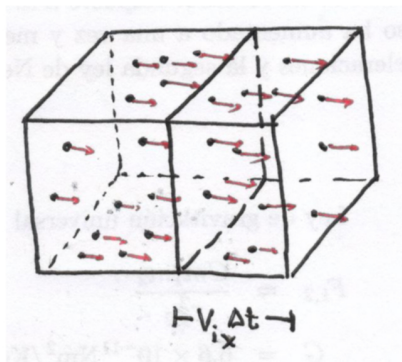
Agrupemos las moléculas según sus velocidades en  $x$ :

$$N = N_1 + N_2 + N_3 + \dots + N_i + \dots \sum_i N_i$$

Hay  $N_i$  moléculas con velocidad  $v_{xi}$

Fuerza debido a los choques de las moléculas con componente  $v_{ix}$  en el tiempo  $\Delta t$ :

$$\Delta P_i = \frac{v_{ix} \Delta t A}{V} N_i \Delta p_i$$





# Modelo cinético del gas ideal

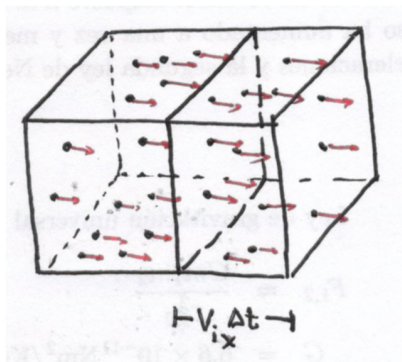
## Presión sobre las paredes del recipiente

Agrupemos las moléculas según sus velocidades en  $x$ :

$$N = N_1 + N_2 + N_3 + \dots + N_i + \dots \sum_i N_i$$

Hay  $N_i$  moléculas con velocidad  $v_{xi}$

Fuerza debido a los choques de las moléculas con componente  $v_{ix}$  en el tiempo  $\Delta t$ :



$$\Delta P_i = \frac{v_{ix} \Delta t A}{V} N_i \Delta p_i$$

$$\Delta P_i = \frac{v_{ix} \Delta t A}{V} N_i 2m v_{ix}$$

$$F_i = \frac{\Delta P_i}{\Delta t}$$

$$F_i = \frac{v_{ix} A}{V} N_i 2m v_{ix} = \frac{2m v_{ix}^2 A N_i}{V}$$