

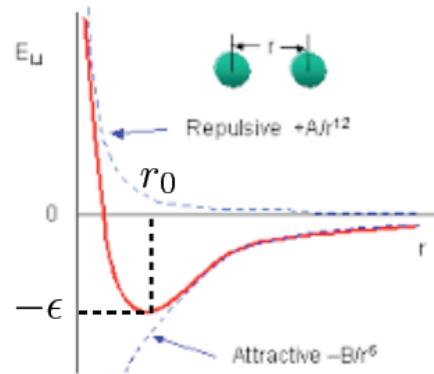
MÉTODOS DE SIMULACIÓN – FÍSICA Taller 1, Ejercicio 5

GAS DE LENNARD-JONES

El potencial de Lennard-Jones,

$$V(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right],$$

es un modelo aproximado de la interacción entre moléculas no polares que combina una fuerza repulsiva de exclusión de Pauli (el término a la potencia 12) con una fuerza atractiva debida a fuerzas de van der Waals (el término a la potencia 6). El potencial presenta un valor mínimo $-\varepsilon$ a una distancia r_0 , que es la distancia de equilibrio (ver Figura). La fuerza derivada de este potencial,



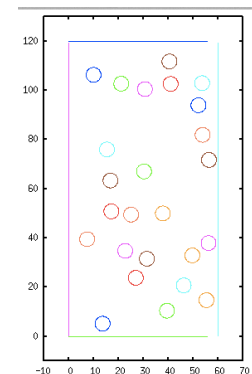
$$F(r) = \frac{12\varepsilon}{r} \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right],$$

es una fuerza restitutiva alrededor de r_0 , que corresponde más o menos a la de un resorte que es difícil de comprimir, pero fácil de estirar.

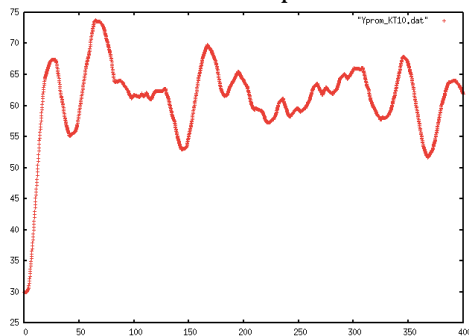
- Construya un programa que simule el movimiento de una partícula bidimensional de masa m bajo el influjo de una fuerza de Lennard-Jones, implementada como una fuerza central. Utilice $m = 1.0$, $R = 2.5$, $\varepsilon = 1.0$ y $r_0 = 10$. Como condición inicial coloque la partícula en $x = 10$, $y = 0$, $V_x = V_0$ y $V_y = 0$, con $V_0 = \sqrt{2k_B T/m}$, donde $k_B T = 0.5$ es la temperatura. Grafique x vs t para $0 < t < 100$, observe cómo oscila y cuadre el paso Δt para que la energía no crezca (esto se puede comprobar verificando que la curva no cambia si se hace Δt diez veces más pequeño).

Ahora el objetivo es construir un gas de partículas que interactúan por Lennard-Jones. Para eso, modifique el programa Gas2D visto en clase de la siguiente manera:

- Modifique la fuerza entre moléculas para que sea la de Lennard-Jones, con los mismos parámetros del punto anterior.
- Como condición inicial, coloque un cuadrado de 5×5 partículas en las posiciones $x=10,20,30,40,50$ y $y=10,20,30,40,50$, con magnitud de velocidad inicial $V_0 = \sqrt{2k_B T/m}$, con $k_B T = 10.0$, y dirección de la velocidad θ escogida al azar entre 0 y 2π .
- Quite los granos que hacen las veces de paredes. En su lugar, piense que hay paredes rígidas en las posiciones $x=0$, $x=60$, $y=0$ y $y=120$ (que es también el espacio a graficar en la animación) y añada fuerzas globales ejercidas por las paredes de la siguiente manera: si la distancia d a la pared es menor que R (el radio de la partícula), añada una fuerza repulsiva ejercida por la pared $F = Kh^{1.5}$, con $k = 1.0 \times 10^4$ y h = la distancia de interpenetración aparente.
- Reduzca el paso Δt a la décima parte del valor usado en el punto anterior (lo que seguramente dará un paso de tiempo $\Delta t \sim 1.0 \times$



10^{-3}) y simule un tiempo total de $t_{\text{sim}} = 200$. Grafique la altura promedio y_{prom} de las 25 partículas y observe cuánto tiempo necesita para que lleguen a oscilar alrededor de un valor promedio. Tome ese valor como tiempo de equilibrio t_{eq} .

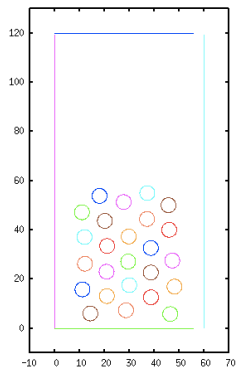


f) Una vez alcanzado el tiempo de equilibrio, calcule e imprima las componentes v_x de la velocidad y calcule la desviación estándar de estos valores. Además, haga el histograma correspondiente y compruebe que los datos se distribuyen como una gaussiana centrada en cero con desviación estándar

$$\sigma_v = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}.$$

g) Reajuste la temperatura a $k_B T = 0.1$ y observe si las moléculas se reordenan en un cristal hexagonal, reproduciendo el comportamiento de un sólido, y tome una imagen de la configuración final. A continuación, reajuste la temperatura a $k_B T = 1.0$ y observe si las moléculas aproximan el comportamiento de un líquido, y tome nuevamente una imagen de la configuración final.

h) Reajuste el alto de la caja a 60, vuelva a fijar una temperatura de $k_B T = 10.0$ y – una vez pasado el tiempo de equilibrio – simule por $t_{\text{sim}} = 200$. A lo largo de este periodo de tiempo, sume la intensidad de las colisiones de las moléculas del gas contra las paredes, definiendo la intensidad como el cambio en la componente perpendicular del momentum de una molécula que choca contra la pared, y divídala por el tiempo de simulación $t_{\text{sim}} = 200$. Este valor, dividido por el lado de la caja $L = 60$, dará la presión del gas. Igualmente, mida la temperatura a partir de la desviación estándar de las componentes horizontales de la velocidad, tal como en el punto f).



i) Repita el paso h) para valores de temperatura de $k_B T = 2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0, 7.0, 8.0, 10, 15$ y 20 . Grafique la presión contra la temperatura, y observe si existe alguna desviación de la relación lineal esperada para un gas ideal.

Para la entrega

El envío (.pdf de la presentación y programas .cpp) debe contener:

- El programa .cpp que implementa la simulación del punto a).
- El programa .cpp que implementa la simulación del gas de Lennard-Jones.
- Las gráficas de los puntos a), e), f), g) e i).

Referencias

- [1] https://es.wikipedia.org/wiki/Potencial_de_Lennard-Jones