

Tarea 5

DE2 (2021-1)

Objetivos

- Generar distribuciones uniforme y gaussiana de números aleatorios.
 - Implementar un código de simulación de Dinámica Browniana para el cálculo de las propiedades estructurales (función de distribución radial) y dinámicas (desplazamiento cuadrático medio) de sistemas con modelos de potencial de interacción continuos.
- I. Generar 10,000 números aleatorios e ilustrar su distribución para dos casos
 - a) Distribución uniforme
 - b) Distribución Gaussiana
 - II. Elaborar el código de simulación de Dinámica browniana (DB), utilizando u modelo de potencial par de Yukawa

$$\beta u(r) = K \frac{\exp(-\kappa r)}{r}$$

tomando $K=A*\exp(zk)$ con $A=556$ y $zk=0.149$. Calcular la función de distribución radial y el desplazamiento cuadrático medio. Comparar sus resultados con los proporcionados por el profesor.

- III. Potencial Gaussiano (ver referencia 1)

$$u(r) = \varepsilon e^{-\kappa \left(\frac{r}{\sigma}\right)^2}$$

- IV. Potencial de Potencia Inversa (ver referencia 2).

$$u(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^n$$

- V. Potencial de Lennard-Jones (ver referencia 3).

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$

- VI. Potencial Doble Gaussiana desplazada (ver referencia 4).

$$u(r) = \exp\{-r^2\} - \eta \exp\{-(r-3)^2\},$$

VII.- Potencial entre partículas con momentos dipolares magnéticos, con concentración reducida de 0.041 y $\Gamma = 4.4$ (ver referencia 5)

$$\beta u(r) = \frac{\Gamma}{r^3}$$

Actividades:

Partiendo de una configuración inicial regular o aleatoria, muestre los resultados que obtiene, tomando como base las referencias citadas que se le sugieren u otra que Usted seleccione sobre su sistema modelo.

En el reporte incluir en cada caso:

- a) Configuración inicial y final.
- b) Curva de termalización (energía potencial por partícula)
- c) Función de distribución radial.
- d) Desplazamiento cuadrático medio
- e) Valor promedio de la Energía Potencial del sistema.
- f) Valor promedio de la Presión del sistema.

Referencias:

- [1] Fluid and solid phases of the Gaussian core model. J. Phys.: Condens. Matter 12 (2000).
- [2] Comparison of structure and transport properties of concentrated hard and soft sphere fluids. J. Chem. Phys. 130, 174903 (2009).
- [3] Radial Distribution Functions and the Equation of State of Fluids Composed of Molecules Interacting According to the Lennard-Jones Potential . J. Chem. Phys. 20, 929 (1952).
- [4] Phase behavior near and beyond the thermodynamic stability threshold. PRE 92, 050301(R) (2015).
- [5] Hydrodynamic Interactions May Enhance the Self-Diffusion of Colloidal Particles. PRL 79, (1997)

Distribucion de los casos:

I y II: TODOS

VII.- Jesus Marcel, Rolando Abdel, Daniela, Vladimir.

VI.- Fatima Fernanda, Jose Daniel, Eduardo, Jesus Roberto.

V.- Marco Antonio, Claudeth Clarissa, Antonio, Cesar Andres.

IV.- Julio Cesar, Antonio Jose, Luis Alfonso.

III.- Jesus Giovanni, Fidel Alejandro, Juan Jose.