

Actividad 1.

Considere una simulación de Monte Carlo para un sistema bidimensional con un modelo de potencial de disco duro.

Implementar el código presentado en clase (o su análogo) para construir una configuración inicial aleatoria bidimensional sin traslapes con margen en frontera. Ejecutar su programa para obtener configuraciones iniciales para los casos siguientes:

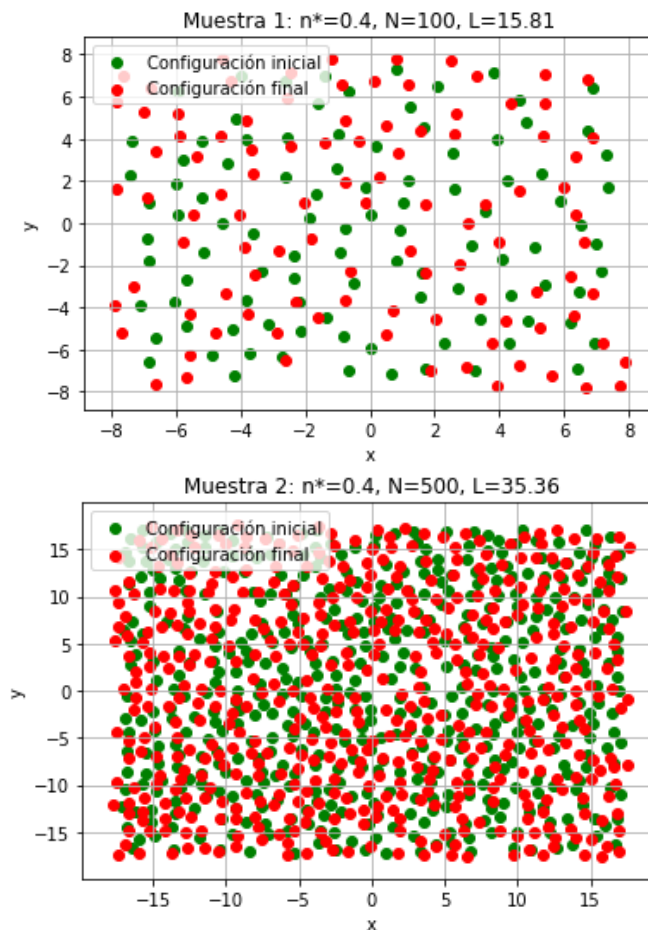
a) Concentración reducida fija en $n^* = 0.4$ y $N = 100, 500$ y 1000 partículas.

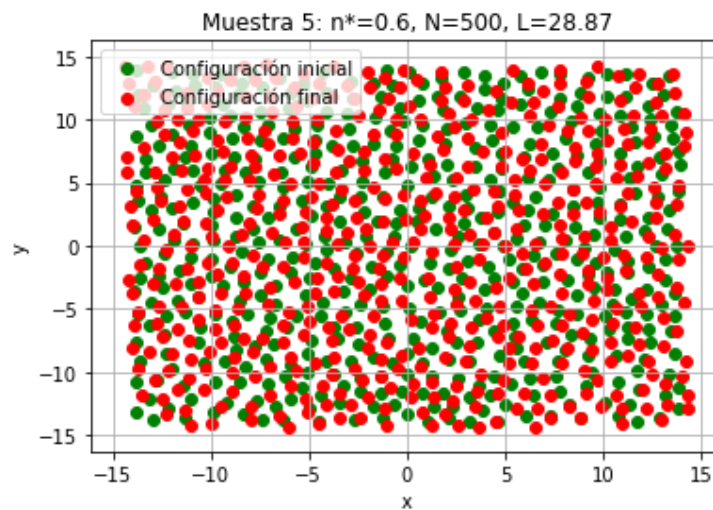
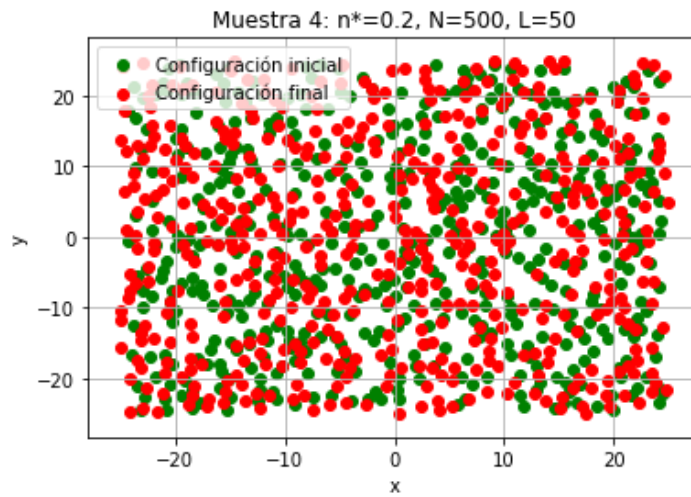
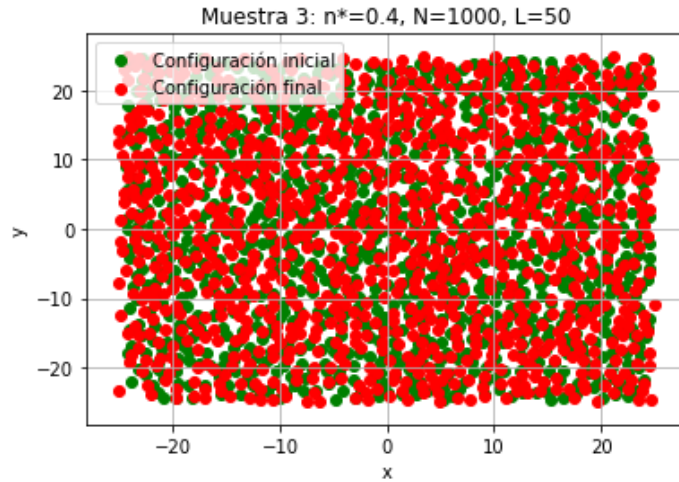
b) Número de partículas fijo en $N=500$ y $n^* = 0.2, 0.6$ y 0.8 .

En cada caso:

- Incluir en su código la instrucción que lleve a mostrar la longitud de la celda de simulación.
- Mostrar gráficamente la distribución de partículas (en la configuración final) obtenida donde se aprecie con claridad la longitud de la celda correspondiente.

Resultados obtenidos





(Nota: No se pudo encontrar una configuración inicial para $n^=0.8$ y $N=500$)*

Actividad 2: Empaquetamiento de esferas duras.

Para un sistema de esferas duras del mismo diámetro (monodisperso, de una sola especie), investigar sobre el valor de la máxima fracción en volumen (close packing).

Si encuentra los valores de empaquetamiento aleatorio (random close packing) incluya sus valores también.

Para un sistema de esferas duras monodisperso, los átomos ocupan el 74% del espacio de la celda, y el 26% restante es espacio vacío. Esto es debido a que la densidad media que se obtiene al ordenar las partículas en empaquetamiento de tipo “close packing” (o sea, hexagonal), es de alrededor del 0.74048. Por otro lado, cuando tenemos un empaquetamiento monodisperso de “random close packing” el valor es de 0.64.

Actividad 3.

Modifique el código MC elaborado para esferas duras, para el caso de un potencial de interacción par $u(r)$ de pozo cuadrado (square well), descrito como:

$$u(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r \leq \sigma \\ -\epsilon & \text{si } \sigma < r < \lambda \\ 0 & \text{si } r \geq \lambda \end{cases}$$

donde: σ es el diámetro de las partículas, λ y ϵ el alcance y la profundidad del pozo cuadrado respectivamente. Explore tomando como parámetros (adimensionalizados) fijos $\lambda^* = 1.25$ y $T^* = 1.0$, así mismo, considere una concentración reducida de $n^* = 0.4$.

- i) Muestre una gráfica de la configuración inicial y otra de la configuración final**
- ii) Muestre una gráfica de la variación de la energía potencial total en las diferentes configuraciones que cubre la simulación.**
- iii) Muestre una gráfica que ilustre todas las posiciones que ocupa una partícula trazadora a lo largo de la simulación**

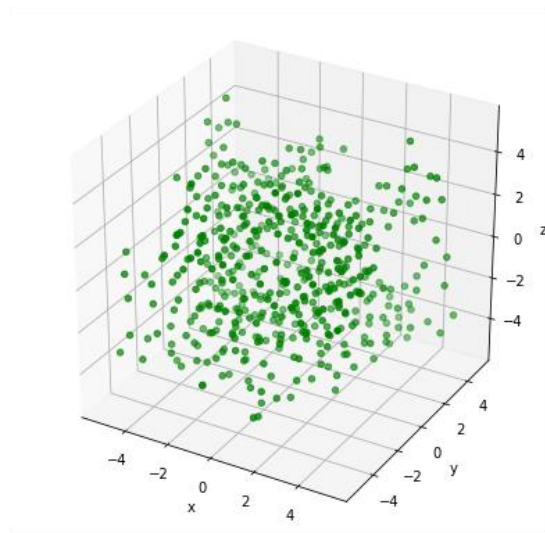
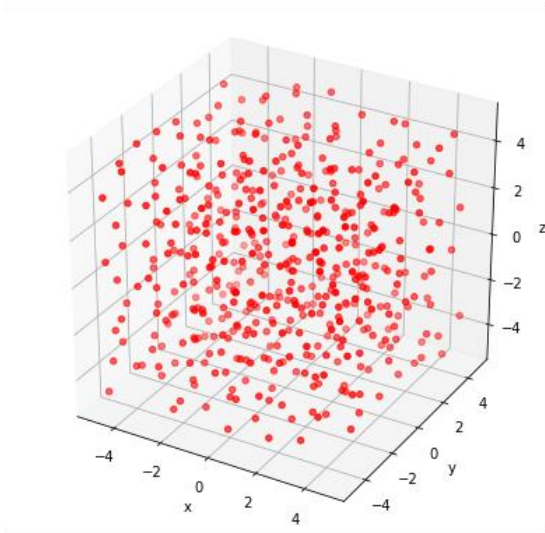
Antono Reyes Montaña

216212080

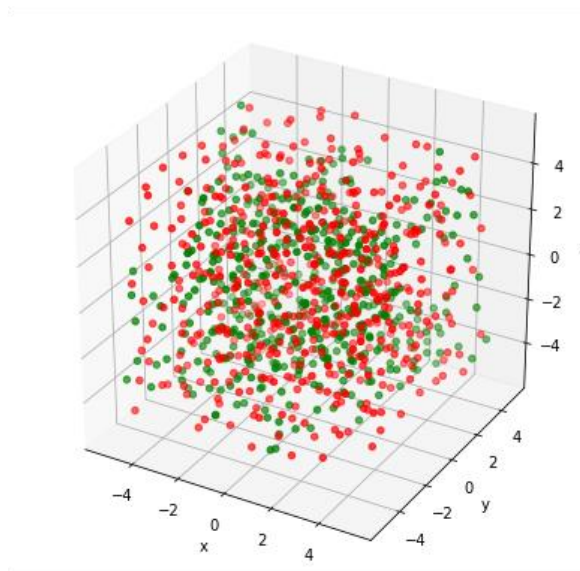
Desarrollo Experimental II – Tarea 3

Configuración inicial: $n^*=0.4$, $N=500$, $L=10.77217$

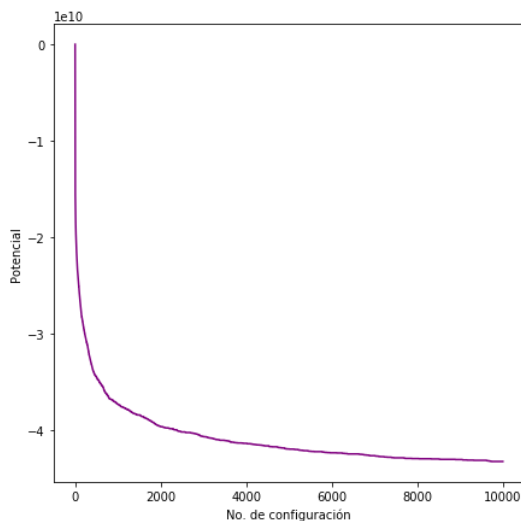
Configuración final: $n^*=0.4$, $N=500$, $L=10.77217$



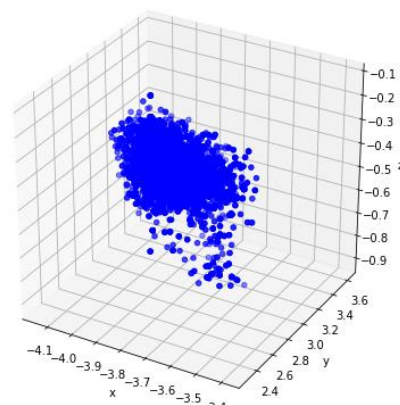
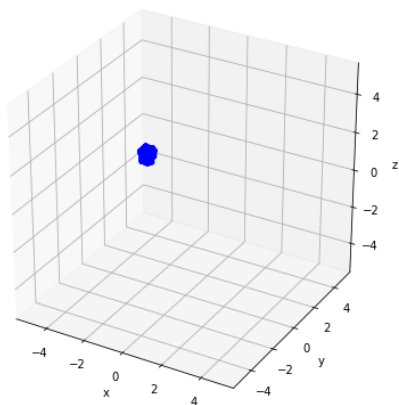
Configuración inicial(rojo) y final(verde): $n^*=0.4$, $N=500$, $L=10.77217$



Variación de energía potencial: $n^*=0.4$, $N=500$, $L=35.36$



Configuraciones de la partícula trazadora en la celda (10000 configuraciones) Configuraciones de la partícula trazadora (10000 configuraciones)- Acercamiento



Referencias

- Libretexts. (2020, August 21). Closest packed structures. Retrieved March 16, 2021, from [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Physical_Properties_of_Matter/States_of_Matter/Properties_of_Solids/Crystal_Lattice/Closest_Pack_Structures](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Physical_Properties_of_Matter/States_of_Matter/Properties_of_Solids/Crystal_Lattice/Closest_Pack_Structures)
- Projects, C. (2021, February 27). Atomic packing factor. Retrieved March 16, 2021, from https://es.qaz.wiki/wiki/Atomic_packing_factor
- Vasili Baranau, & Ulrich Tallarek. (2014, March 03). Random-close packing limits for monodisperse and polydisperse hard spheres. Retrieved March 16, 2021, from <https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2014/sm/c3sm52959b>