

## Tarea 4

### Objetivo

Implementar un código de simulación de Monte Carlo para el cálculo de las propiedades estructurales y termodinámicas de sistemas con modelos de interacción de potencial de Lennard-Jones.

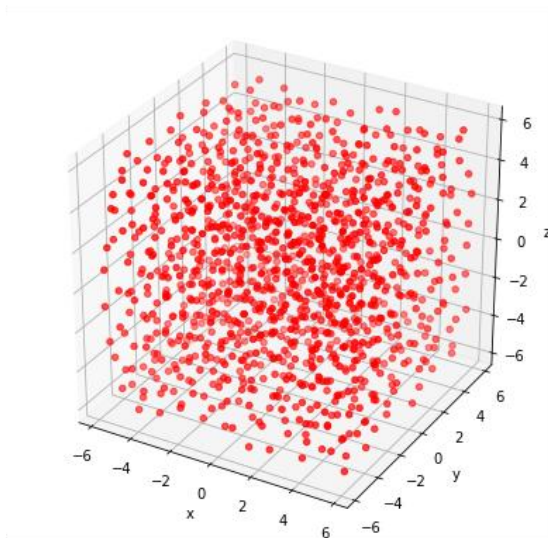
$$u(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

### Actividades

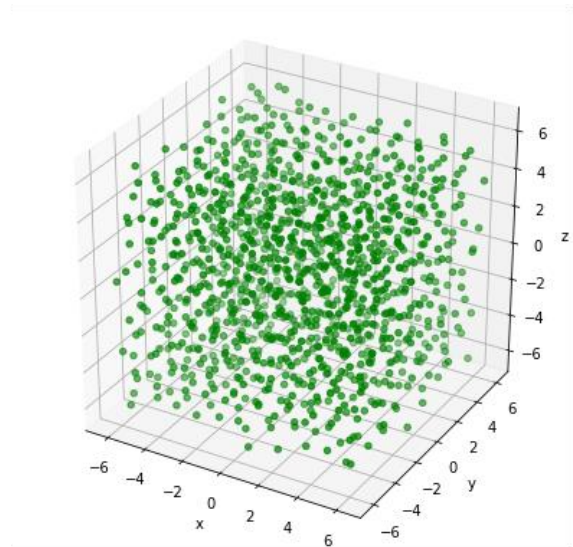
Partiendo de una configuración inicial regular o aleatoria, muestre los resultados que obtiene, tomando como base las referencias citadas que se le sugieren u otra que Usted seleccione sobre su sistema modelo.

#### a) Configuración inicial y final.

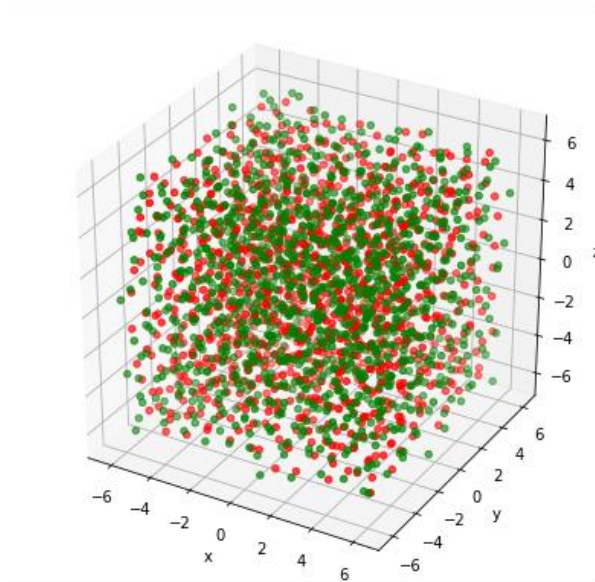
Configuración inicial:  $n^*=0.6$ ,  $N=1200$ ,  $L=12.599$



Configuración final:  $n^*=0.6$ ,  $N=1200$ ,  $L=12.599$

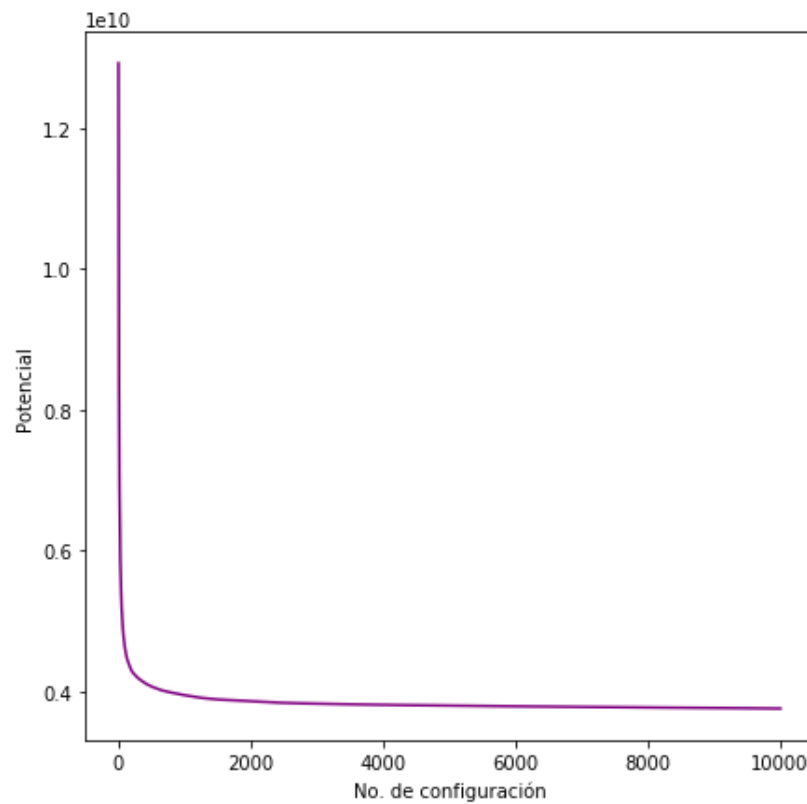


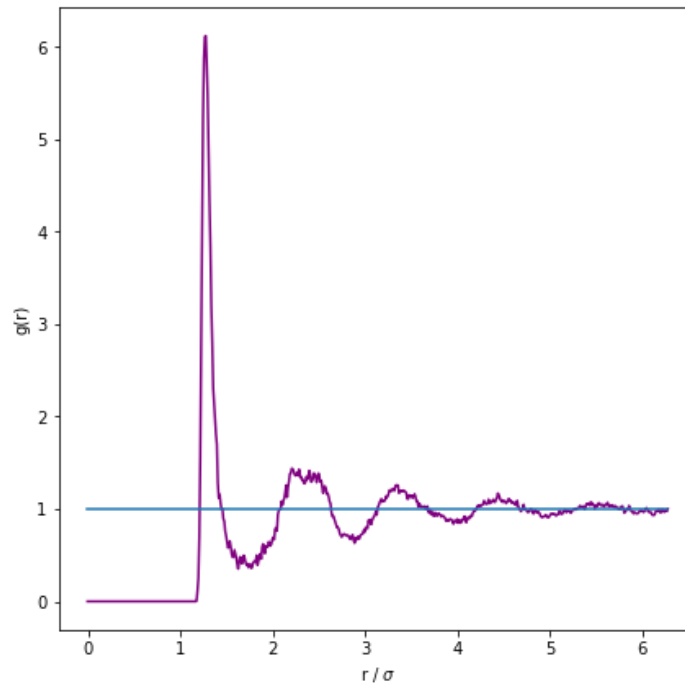
Configuración inicial(rojo) y final(verde):  $n^*=0.6$ ,  $N=1200$ ,  $L=12.599$



**b) Curva de termalización (energía potencial por partícula)**

Variación de energía potencial:  $n^*=0.6$ ,  $N=1200$ ,  $L=12.599$



**c) Función de distribución radial.**Función de distribución radial:  $n^*=0.6$ ,  $N=1200$ ,  $L=12.599$ 

Vemos que, al comparar con las distribuciones radiales en las referencias, la gráfica obtenida de la simulación está un poco desplazada a la derecha y los picos tienen diferentes amplitudes debido a los parámetros utilizados, sin embargo se observa un comportamiento bastante similar al de la literatura:

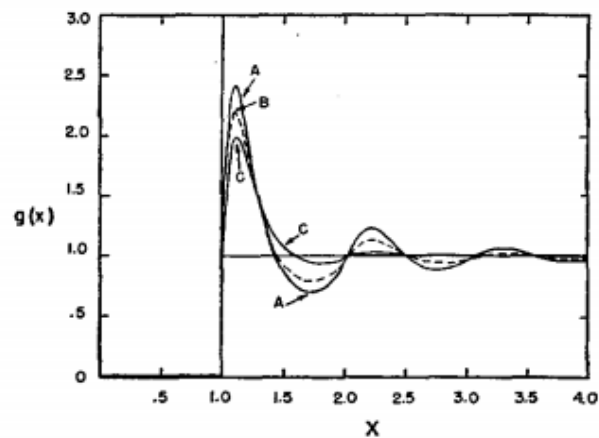


FIG. 1. Theoretical radial distribution function  $g_2(x)$  versus reduced distance  $x$ . Fixed temperature ( $\beta\epsilon=0.8$ ,  $T^*=1.25$ ), increasing density (A,  $\lambda=5$ ,  $v^*=3.46$ ; B,  $\lambda=20$ ,  $v^*=1.48$ ; C,  $\lambda=27.4$ ,  $v^*=1.22$ ).

Antonio Reyes Montaña

216212080

Desarrollo Experimental II – Tarea 4

**d) Valor promedio de la Energía Potencial del sistema.**

```
1 #Calculamos el promedio de la energía potencial del sistema
2 v = vTraza[6000:]
3 VProm = v.mean()
4 print("El promedio de la energía potencial es ", VProm)
```

El promedio de la energía potencial es 3770027300.2979517

**e) Valor promedio de la Presión del sistema**

```
1 #Calculamos la presión del sistema
2 phs = pres(rt, gdr, nr)
3 print('La presión del sistema es: PHS =', phs)
```

ICONTACTO = 628 , GDR DE CONTACTO = 1.0003115854306746

La presión del sistema es: PHS = 1.8570286112359065

**Referencia:**

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).