

# Recuperatorio: Simulación de Partículas en un Pozo de Potencial 2D

Computacion III - INSPT

En este ejercicio, simularemos un sistema de partículas en dos dimensiones utilizando el método de Monte Carlo y por qué no Euler también. Nuestro objetivo es estudiar partículas en equilibrio térmico, veremos la distribución de posiciones y velocidades de las partículas en un pozo de potencial, y calcularemos sus propiedades energéticas.

## 1 Aplicaciones

Los modelos de potencial armónico se utilizan para entender las propiedades térmicas y mecánicas de los materiales. Nosotros evaluaremos partículas en un pozo de potencial en equilibrio térmico, pero, por ejemplo, se utiliza en la teoría de vibraciones de redes (teoría de los fonones), se asume que los átomos en una red cristalina están sujetos a fuerzas restauradoras que pueden ser aproximadas por un potencial cuadrado (o armónico). También se utiliza en el estudio de deformaciones de ciertas proteínas al someterse a cambios en su entorno, influyendo en su función biológica. Entre otras aplicaciones.

## 2 Objetivo del Examen

Se espera que logres:

1. **Generar un conjunto de partículas en 2D:** Inicialmente, las partículas tienen posiciones y velocidades aleatorias.
2. **Simular el comportamiento de las partículas en equilibrio térmico:** Actualizar las posiciones y velocidades de las partículas con condiciones iniciales randomizadas durante la simulación.
3. **Calcular propiedades energéticas:** Determinar la energía cinética y potencial del sistema.
4. **Visualizar los resultados:** Mostrar la distribución de posiciones y velocidades de las partículas al finalizar la simulación.

### 3 Descripción del Sistema

1. **Posiciones:** Inicialmente las partículas están distribuidas aleatoriamente dentro de una pozo de potencial bidimensional.
2. **Velocidades:** Las velocidades de las partículas siguen una distribución normal y están escaladas por la temperatura del sistema para simular equilibrio térmico.

### 4 Pasos del Ejercicio

#### 1. Inicialización:

- En el contexto de simulaciones de dinámica molecular y física computacional, la temperatura se usa a menudo en términos de  $k_b T$ , donde  $k_b$  es la constante de Boltzmann  $1.38 \times 10^{23} \frac{J}{K}$  y  $T$  es la temperatura en kelvins. **Para simplificar los cálculos, usaremos  $k_B T = 1.0$ , Para simulaciones más precisas y completas, especialmente en aplicaciones reales, es necesario considerar las constantes físicas adecuadas y las unidades. Podés también probar cambiando este valor.**
- Para implementar Euler y poder obtener la velocidad en cada iteración, hemos de calcular la aceleración en función a las fuerzas. Nuevamente por simplicidad, vamos a asumir una masa  $m = 1$ , y así simplificaremos el cálculo de la aceleración ya que será equivalente a la fuerza.
- Generar  $n$  partículas con posiciones aleatorias en un rango de  $[-1, 1]$  en ambas direcciones  $(x, y)$ , es decir, crear dos vectores de  $n$  partículas con las coordenadas aleatorias  $x$  e  $y$ , representarán la distancia al centro del pozo de potencial.
- Asignar a cada partícula una velocidad inicial aleatoria, multiplicada por la raíz cuadrada de la temperatura, es decir, nuevamente dos vectores con las velocidades en  $x$  e  $y$  para  $n$  partículas.

#### 2. Potencial:

- En el ejercicio que estamos queriendo resolver, suponemos partículas en un pozo de potencial simplificado. Dependiendo del tipo de pozo, el potencial varía. Para nuestro ejercicio será un potencial cuadrado, que se suele utilizar para sistemas en equilibrio térmico. El potencial en cuestión es  $U(r_i) = \frac{1}{2} k r_i^2$  donde  $r_i$  es el vector posición de la partícula  $i$  respecto al centro, y  $k$  la constante que define la 'rigidez' o fuerza de un resorte en el modelo de Hooke.
- Por otro lado, sabemos que la fuerza es la derivada del potencial respecto a la posición.  $F_i = -k r_i$

- Si simplificamos (sí, de nuevo) y asumimos  $k = 1$ , el potencial se reduce a  $U = \frac{1}{2}r_i^2$  y la fuerza termina siendo  $F = -r_i$ , si te animás, probá con algún otro  $k$  para ver cómo se comporta tu sistema.

### 3. Simulación:

- Creá una función de fuerza, a la cual le vas a pasar por parámetro la posición en una coordenada dada, y la constante  $k$ . Vas a usarlo para calcular la fuerza en  $x$  y en  $y$  en cada iteración.
- Para cada paso de simulación tenés que:
  - Actualizar las posiciones del vector de partículas en función de sus velocidades actuales.
  - Con las posiciones actualizadas, obtener la aceleración (fuerza).
  - Actualizar las velocidades de las partículas en función a la aceleración.

### 4. Cálculo de Energías:

- **Energía Cinética:** Calculada como  $K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2)$ , donde  $v$  es la velocidad de cada partícula. Sumá la energía de todas las partículas para obtener la energía cinética total.
- **Energía Potencial:** Calculada como  $U = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2)$ , donde  $x$  es la posición de cada partícula en la caja. Sumá la energía de todas las partículas para obtener la energía potencial total. Para sumar todos los componentes de un vector en NumPy podés utilizar la función `np.sum(vector_x)`.

### 5. Visualización:

- Graficá las posiciones iniciales y finales de las partículas en la caja. No es necesario graficar el paso a paso. ¿Qué podés observar? ¿Qué conclusiones podés sacar?
- Mostrá la distribución de las componentes de velocidad en los ejes  $x$  e  $y$ . Para ello podés recurrir a un histograma.