

Desarrollo Experimental II

Tarea 3

Movimientos Arbitrarios y Condiciones Periódicas

Objetivos:

1. Elaborar o modificar el código elaborado para la construcción de configuraciones iniciales, para iniciar el movimiento aleatorio de las partículas. Si bien las partículas tienen tamaño, permitiremos configuraciones con traslapes posteriores a la inicial.
2. Introducir los conceptos de *celda central*, *celdas imágenes* y *condiciones periódicas*.

Actividad 1. Sin condiciones periódicas

A partir de una configuración inicial aleatoria bidimensional o de la lectura de la misma en un código nuevo, mover aleatoriamente a N partículas una distancia $\Delta\vec{r} = (\Delta x, \Delta y)$ un número de ciclos $NSTEP$. (Sugerencia: considerar $N=100$, $\phi=0.4$, $NSTEP=1000$, $\delta_{MAX} = 0.5\sigma$, donde δ_{MAX} es el desplazamiento máximo en x y y de cada paso que da cada partícula).

- i. Graficar las configuraciones inicial y final y analizar las posiciones de las partículas en relación a las fronteras de la celda central.
- ii. Comente respecto de los valores de las concentraciones reducidas inicial y final.

(Para las actividades que siguen con Condiciones Periódicas)

Actividad 2.

Incorporar en el código del programa elaborado en la Actividad 1 las condiciones periódicas correspondientes. Repetir de nuevo la Actividad 1 para este caso.

Actividad 3.

Incorporar en el código del programa de la Actividad 2, las instrucciones necesarias para seguir a un par de partículas en su movimiento (*trazadoras*):

- i. Seleccionar aleatoriamente a dos partículas trazadoras.
- ii. En una sola figura, ilustrar las trayectorias de las dos trazadoras.
- iii. Comentar al respecto del comportamiento observado.

Actividad 4.

Extender las Actividades 2 y 3 a un sistema en 3D de N partículas esféricas cuya fracción en volumen es $\phi=0.1$. {Sugerencia: $N=100$, $NSTEP=100,000$, $\delta_{MAX} = 0.1\sigma$ }:

- i. Graficar y comparar las configuraciones inicial y final. Comente al respecto de las posiciones de las partículas en relación a las fronteras de la celda central.
- ii. Graficar y comparar el movimiento de 3 partículas trazadoras.

Actividad 5.

De forma similar a la Actividad 4 anterior, partiendo de una *configuración inicial cúbica uniforme* de N partículas:

- i. Graficar las configuraciones inicial y final. Comente respecto de sus estructuras.
- ii. Graficar y comparar el movimiento de dos partículas trazadoras, una de las cuales se encuentra inicialmente en la frontera de la celda central y la otra en la zona central de la misma. {Sugerencia: $NSTEP=1,000,000$, $\delta_{MAX} = \sigma$ }.

Actividad 6.

Para un sistema de discos duros (HD) y partiendo de una configuración inicial sin traslapes, calcule la energía potencial reducida promedio por partícula ($v^*=V^*/N$) de cada configuración (puede hacer uso de los datos que se sugieren en la Actividad 4). Elabore una gráfica de v^* vs *configuración* para cada una de las concentraciones reducidas $n^* = 0.1-1.0$. Comente al respecto de los resultados obtenidos.