

# Simulación de Dinámica Molecular: Gas de Lennard-Jones en 2D

## Examen 2 - Problema 1

Jorge Garzón

Curso de Física Computacional 2  
Profesor: John Hernán Díaz

Diciembre 2025

# Objetivos del Proyecto

## Objetivo General

Simular la evolución temporal de un sistema de  $N$  partículas confinadas interactuando mediante el potencial de Lennard-Jones.

## Objetivos Específicos:

- Implementar el potencial de interacción  $U(r)$  y derivar la fuerza  $\vec{F}(r)$ .
- Utilizar el integrador **Velocity Verlet** para garantizar estabilidad energética.
- Diseñar un software modular en C++ (POO) reproducible.
- Comparar fenomenológicamente un **gas diluido** vs un **fluido denso**.

# Modelo Físico: Lennard-Jones

La interacción entre pares de partículas está dada por:

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

## Características:

- **Repulsión** ( $r^{-12}$ ): Principio de exclusión de Pauli (corto alcance).
- **Atracción** ( $r^{-6}$ ): Fuerzas de Van der Waals (largo alcance).

Fuerza Derivada  $\vec{F} = -\nabla U$

$$F(r) = \frac{24\epsilon}{r} \left[ 2 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

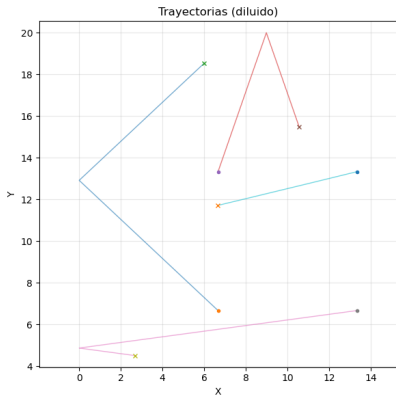
## Integrador: Velocity Verlet

- 1  $\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2$
- 2 Calcular nuevas fuerzas  $\vec{F}(\vec{r}(t + \Delta t))$
- 3  $\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}[\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)]\Delta t$

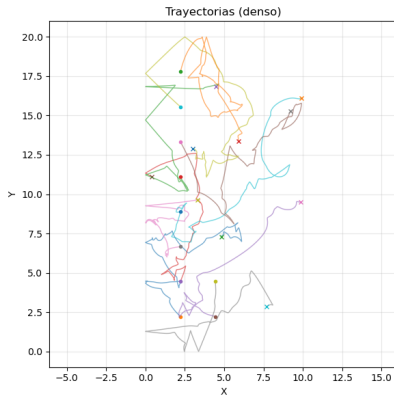
## Arquitectura del Software (C++):

- Particle: Estado cinemático  $(x, y, v_x, v_y, f_x, f_y)$ .
- Box: Condiciones de frontera reflectivas.
- LennardJones: Cálculo de fuerzas (hereda de ForceCalculator).
- VelocityVerlet: Evolución temporal.

# Resultados: Trayectorias y Regímenes



**Gas Diluido ( $N = 4$ )**



**Fluido Denso ( $N = 64$ )**

**Observación:** En el caso diluido, el movimiento es casi balístico (líneas rectas). En el denso, se observa el confinamiento local (caging) debido a las múltiples interacciones repulsivas.

# Validación: Conservación de Energía

Para un sistema aislado (paredes elásticas, fuerzas conservativas), la energía total debe ser constante.

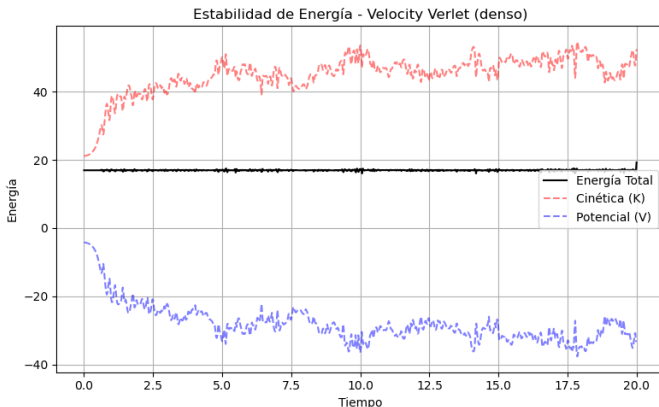
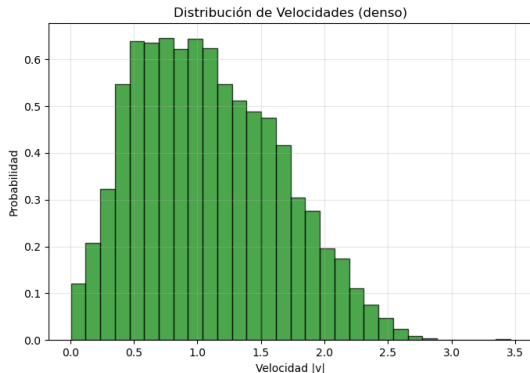


Figura: Energía Cinética (K), Potencial (V) y Total (E) para  $N = 64$ .

# Estadística: Distribución de Velocidades

¿Alcanza el sistema el equilibrio térmico?



## Análisis:

- Inicialmente las velocidades eran aleatorias uniformes.
- Tras las colisiones, el histograma converge a una distribución tipo **Maxwell-Boltzmann (2D)**.
- Esto indica que el sistema ha termalizado correctamente.

# Conclusiones

- 1 **Correctitud Numérica:** El integrador Velocity Verlet demostró ser robusto y estable para el potencial rígido de Lennard-Jones, conservando la energía a largo plazo.
- 2 **Transición de Fase Dinámica:** Se evidenció visualmente la diferencia entre el régimen de *Gas Ideal* (trayectorias libres) y el régimen de *Líquido* (difusión restringida).
- 3 **Equilibrio Termodinámico:** El sistema evoluciona espontáneamente hacia una distribución de velocidades de equilibrio debido a las interacciones no lineales.
- 4 **Reproducibilidad:** El código implementado es modular, permitiendo cambiar parámetros ( $N$ , dimensiones,  $\epsilon$ ) fácilmente para futuros experimentos.



# ¡Muchas Gracias!

¿Preguntas?

Repositorio: <https://github.com/georgfis/INteraccion-L-J>