

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

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

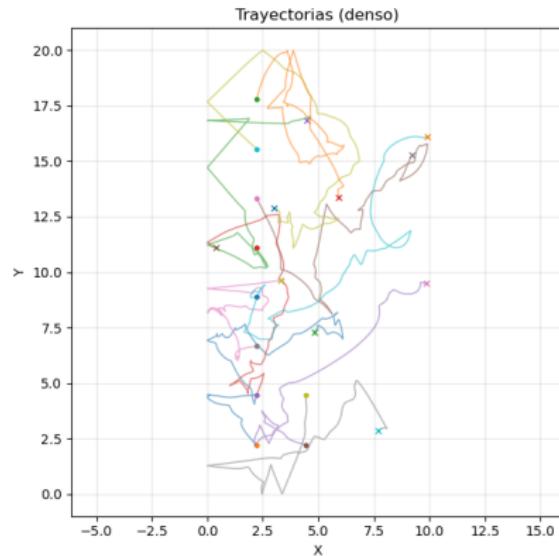
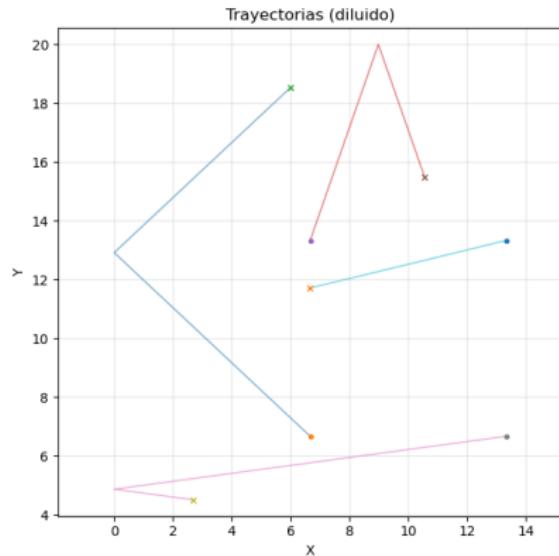
Integrador: Velocity Verlet

- 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



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.

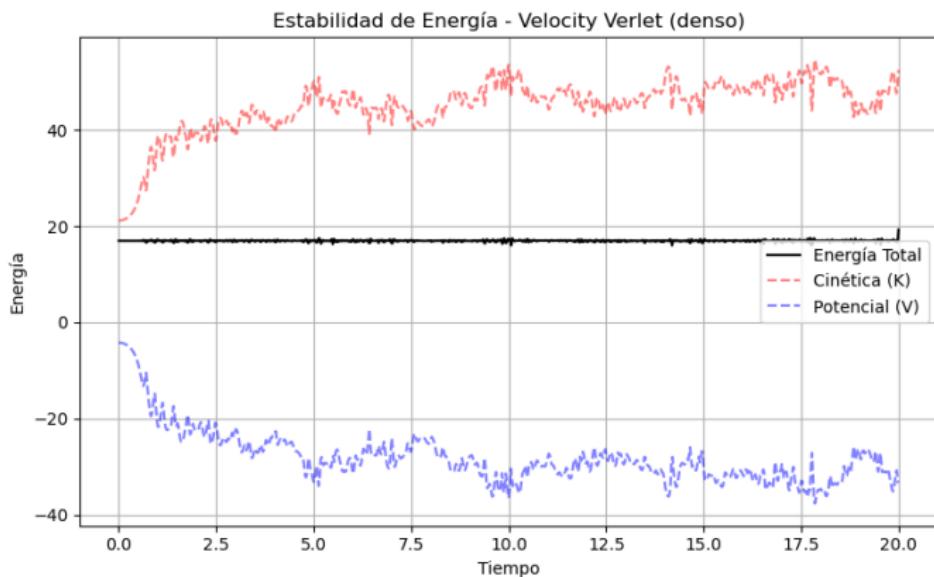
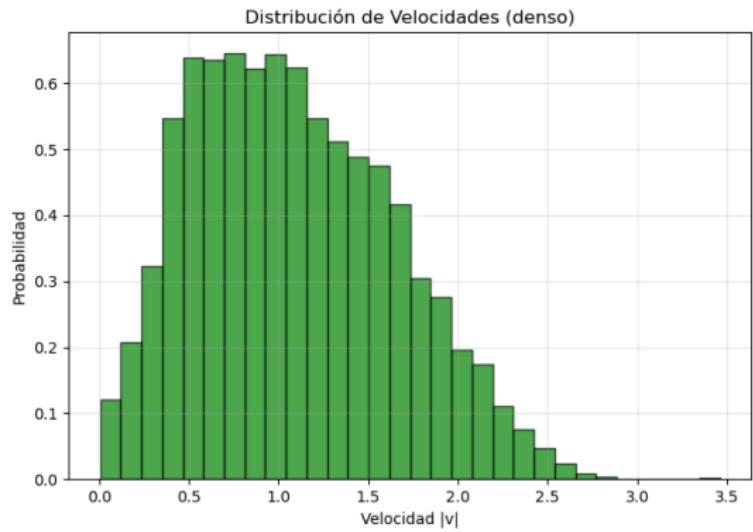


Figura: Energía Cinética (K), Potencial (V) y Total (E) para $N = 64$.

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, ϵ) fácilmente para futuros experimentos.

¡Muchas Gracias!

¿Preguntas?

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