

Simulación de un Gas de Lennard-Jones en 2D

Examen 2 - Física Computacional 2

Jorge Garzón

Diciembre 2025

1. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es simular la dinámica molecular de un gas bidimensional confinado, modelando las interacciones entre partículas mediante el potencial de Lennard-Jones. Específicamente, se busca:

- Implementar un integrador numérico robusto (Velocity Verlet).
- Validar la conservación de la energía mecánica del sistema.
- Comparar cualitativamente el comportamiento dinámico entre un régimen diluido (gas) y uno denso (líquido).
- Verificar la termalización del sistema mediante la distribución de velocidades.

2. Modelo Físico

2.1. Potencial de Lennard-Jones

La interacción entre dos partículas separadas por una distancia r está dada por el potencial:

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (1)$$

Donde ϵ determina la profundidad del pozo de potencial y σ es la distancia finita donde el potencial es cero.

2.2. Derivación de la Fuerza

La fuerza conservativa se obtiene como el negativo del gradiente del potencial, $\vec{F} = -\nabla U(r)$. Derivando respecto a r :

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

La fuerza vectorial sobre una partícula i ejercida por j es:

$$\vec{F}_{ij} = F(r_{ij})\hat{r}_{ij} \quad (3)$$

3. Método Numérico

Se utilizó el algoritmo de **Velocity Verlet**, conocido por su estabilidad simpléctica (conservación del volumen en el espacio de fase) y reversibilidad temporal. Las ecuaciones de actualización son:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2 \quad (4)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}[\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)]\Delta t \quad (5)$$

El software fue implementado en C++ utilizando un diseño orientado a objetos (clases `Particle`, `Box`, `Integrator`), disponible en el repositorio: <https://github.com/georgfis/INteraccion-L-J>.

4. Resultados y Discusión

4.1. Validación: Conservación de Energía

Para validar la estabilidad del integrador, simulamos un sistema denso ($N = 64$) durante 4000 pasos. Como se observa en la Figura 1, aunque existe intercambio constante entre energía cinética y potencial, la energía total se mantiene estable, confirmando la correctitud del integrador.

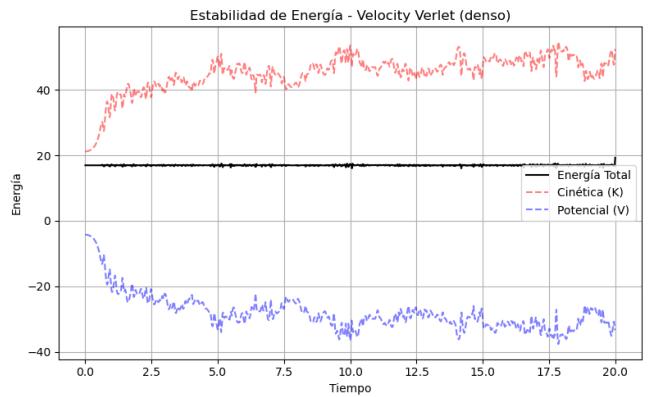


Figura 1: Evolución temporal de las energías. La línea negra (Total) muestra la estabilidad del método Velocity Verlet.

4.2. Comparación Dinámica: Gas vs Líquido

Se realizaron dos experimentos contrastantes. En el caso diluido ($N = 4$, Fig. 2), las partículas recorren largas distancias antes de interactuar (régimen balístico). En el caso denso ($N = 64$, Fig. 3), observamos el efecto de “enjaulamiento”, donde las partículas quedan confinadas localmente por sus vecinas antes de difundirse.

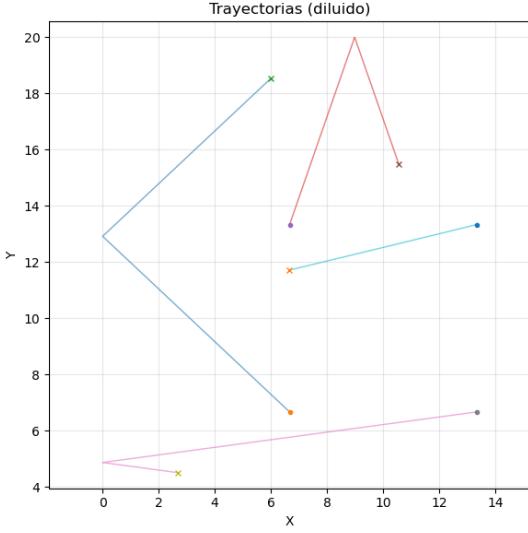


Figura 2: Trayectorias en régimen diluido ($N = 4$). Predominan las líneas rectas y choques con paredes.

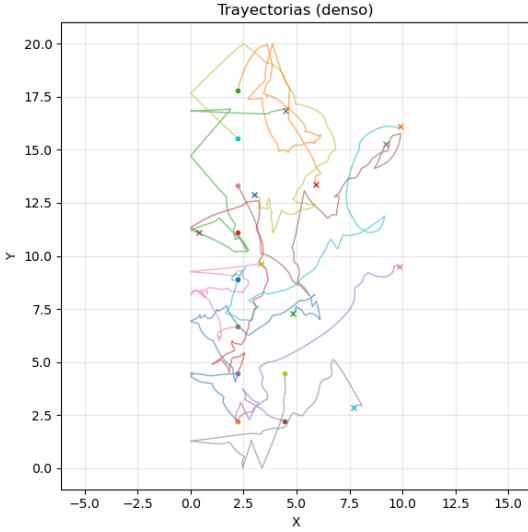


Figura 3: Trayectorias en régimen denso ($N = 64$). Movimiento caótico y confinado.

4.3. Distribución de Velocidades

Finalmente, analizamos el histograma de velocidades del sistema denso. La Figura 4 muestra una distribución que

se aproxima cualitativamente a la distribución de Maxwell-Boltzmann en 2D, indicando que el sistema ha alcanzado el equilibrio termodinámico a través de las colisiones.

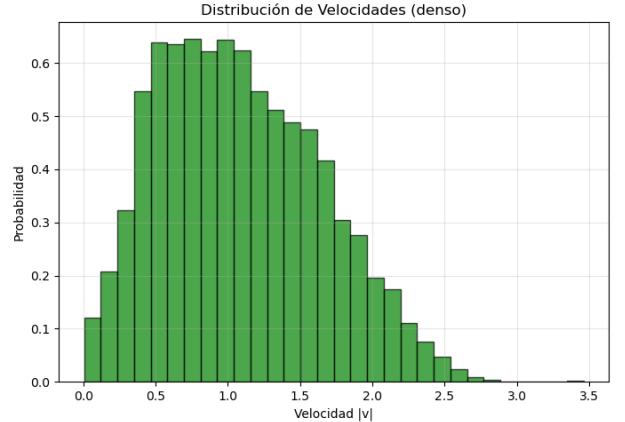


Figura 4: Histograma de velocidades para el gas denso.

5. Conclusiones

Se implementó exitosamente un simulador de dinámica molecular modular en C++. Los resultados validan numéricamente el método de Velocity Verlet mediante la conservación de la energía. Se observaron claramente las diferencias fenomenológicas entre un gas diluido y un fluido denso, reproduciendo el comportamiento esperado de sistemas de Lennard-Jones.