

# Simulación computacional de un gas bidimensional de partículas interactuantes

Juan Manuel Paez

25 de noviembre de 2021

## Resumen

Se analizó un sistema de partículas en una caja bidimensional interactuando con un potencial del tipo Lennard-Jones mediante una simulación computacional. Se encontró que la distribución de velocidades de las partículas en el estado estacionario es de forma gaussiana centrada en cero en cada componente y el módulo de las velocidades sigue la distribución de Maxwell-Boltzmann.

## 1. Introducción

La dinámica molecular busca modelar la evolución temporal de un sistema de partículas utilizando simulaciones computacionales y aplicando las ecuaciones de movimiento de las partículas, a partir de su potencial de interacción. Puede ser aplicada en diversos sistemas, desde atómicos y moleculares hasta sistemas galácticos. En muchos casos las ecuaciones de Newton pueden resultar adecuadas para modelar los sistemas, pero en otros es necesario considerar correcciones cuánticas o relativistas [1].

Un potencial fenomenológico que describe de manera simplificada las colisiones entre átomos neutros (que en el fondo es un problema cuántico) es el potencial de Lennard-Jones [2]:

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

donde  $r$  es la coordenada relativa entre las partículas y  $\epsilon$  y  $\sigma$  son constantes que dependen de la naturaleza de las partículas.

A partir de la expresión del potencial de interacción entre las partículas, la fuerza  $f_{ij}$  de la partícula  $j$  sobre la  $i$  se obtiene según

$$\mathbf{f}_{ij} = -\nabla U(r_{ij}), \quad (2)$$

siendo  $r_{ij}$  la distancia entre las partículas.

El movimiento de la partícula puede obtenerse a partir de la ley de Newton  $\mathbf{f}_i = m_i \mathbf{a}_i$ , donde  $\mathbf{f}_i$  es la fuerza total sobre la partícula  $i$ ,  $m_i$  es su masa y  $\mathbf{a}_i$  su aceleración. Utilizando

el método de Verlet, la posición  $\mathbf{r}_i$  y la velocidad  $\mathbf{v}_i$  de la partícula  $i$  a tiempo  $t + \Delta t$ , a partir de sus valores a tiempo  $t$  vienen dadas por [2]

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}_i(t)(\Delta t)^2 \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + \Delta t))\Delta t\end{aligned}\quad (3)$$

donde las aceleraciones se calculan como

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_i(t) &= -\frac{1}{m_i}\nabla U(\mathbf{r}_i(t)) \\ \mathbf{a}_i(t + \Delta t) &= -\frac{1}{m_i}\nabla U(\mathbf{r}_i(t + \Delta t))\end{aligned}\quad (4)$$

En este trabajo se analizó la evolución de un sistema de partículas interactuando mediante un potencial del tipo Lennard-Jones utilizando el método de Verlet para una simulación computacional.

## 2. Metodología

Se consideró un sistema de  $N = 900$  partículas confinadas en una caja rígida cuadrada de dos dimensiones y lado  $L = \sqrt{\frac{N}{\rho}}$ , con  $\rho = 0.3$  la densidad. Como potencial de interacción se tomó  $U(r) = 4(r^{-12} - r^{-6})$  y las posiciones y velocidades de las partículas se calcularon mediante el método de Verlet con un paso temporal  $h = 0.005$  durante 2000 pasos. Además se consideró una masa unitaria para las partículas.

Como condición inicial se ubicó a las partículas en una red cuadrada con un espaciado  $a = L/31$  entre las partículas vecinas. Para las velocidades iniciales se eligió al azar entre los valores  $\mathbf{v} = (v_x, v_y) = (\pm 1.1, 0)$ .

## 3. Resultados y discusión

En la Fig. 1 se muestra la evolución temporal de la energía cinética del sistema  $E_{kin}$ , la potencial  $E_{pot}$  y la total  $E_{tot} = E_{kin} + E_{pot}$ . Se observa que la energía total del sistema se mantiene constante en el tiempo, ya que el método de Verlet es conservativo (salvo errores de redondeo). Por otro lado, las energías cinética y potencial presentan grandes variaciones al comienzo y luego alcanzan un valor estacionario, lo cual indica que el sistema llegó a un estado de equilibrio.

En las Figs. 2 y 3 se muestran histogramas de la velocidad en  $x$  y en  $y$ , respectivamente, a distintos tiempos. Se observa que las velocidades en  $x$  comienzan distribuidas alrededor de los dos valores iniciales  $\pm 1.1$  y luego se distribuyen alrededor del cero con una forma aproximadamente gaussiana. Para las velocidades en  $y$ , que inicialmente son nulas, se ve que progresivamente se distribuyen también en forma gaussiana alrededor del cero.

En la Fig. 4 se exhibe un histograma para la distribución del módulo de la velocidad en el tiempo final ( $t = 2000 h$ , con  $h = 0.005$  el paso temporal). En este caso la altura de

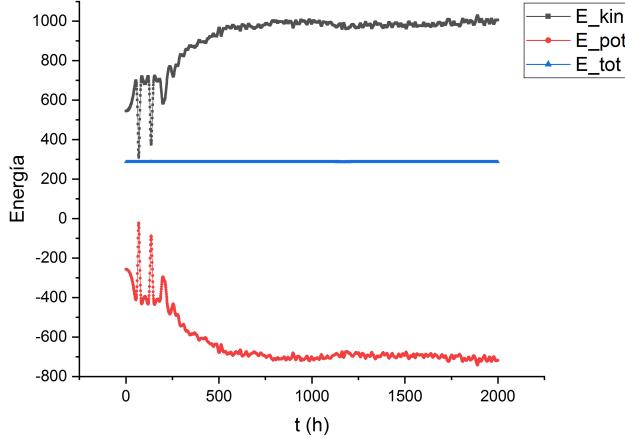


Figura 1: Gráfico de las energías cinética ( $E_{kin}$ ), potencial ( $E_{pot}$ ) y total ( $E_{tot}$ ) en función del tiempo (en unidades de cantidad de pasos  $h = 0.005$ ).

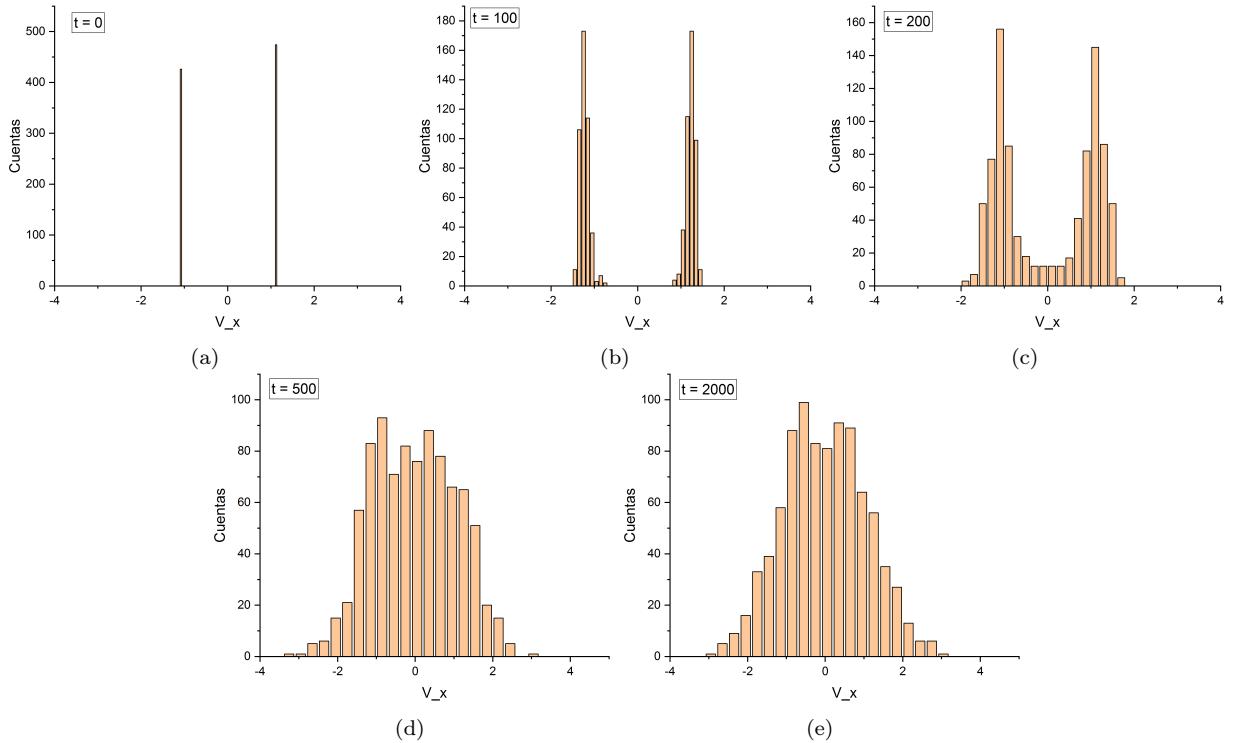


Figura 2: Histogramas para la distribución de las velocidades en la dirección  $x$  a distintos tiempos  $t$  (en unidades de cantidad de pasos  $h = 0.005$ ).

los bines fue normalizada, de modo que tuviera área unitaria. De esta forma se comparó la distribución obtenida con la de Maxwell-Boltzmann para un gas de dos dimensiones, dada por

$$P(v) = \frac{m v}{k T} \exp\left(-\frac{m v^2}{2 k T}\right), \quad (5)$$

donde  $m$  es la masa de las partículas, que en este caso se tomó unitaria,  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura. Para obtener el factor  $k T$  correspondiente a la simulación

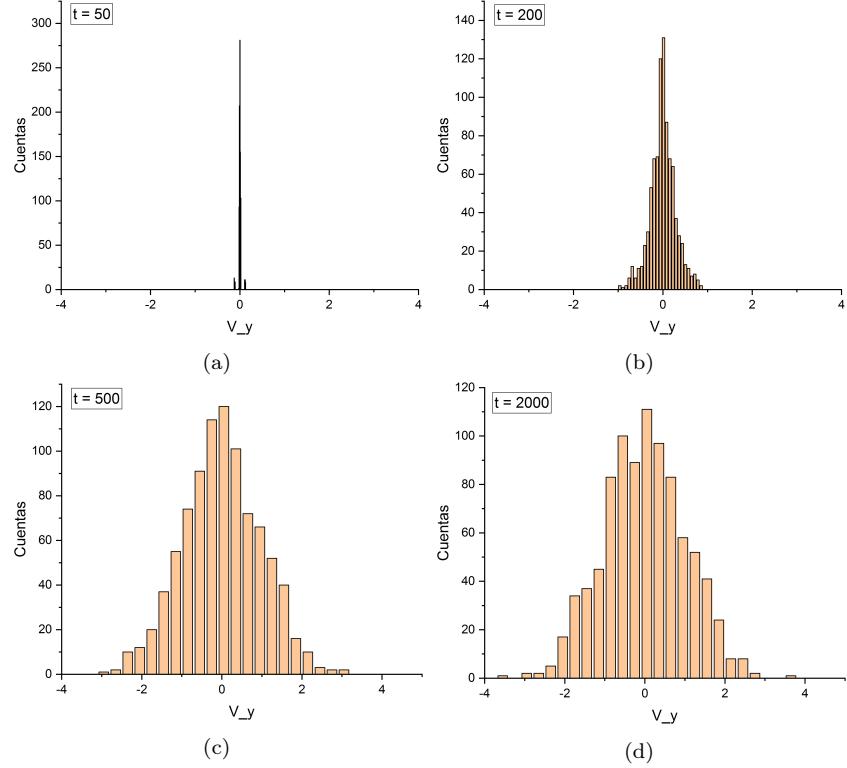


Figura 3: Histogramas para la distribución de las velocidades en la dirección  $y$  a distintos tiempos  $t$  (en unidades cantidad de pasos  $h = 0.005$ ).

realizada se utilizó el valor estacionario de la energía cinética del sistema, obtenido del gráfico de la Fig. 1, según

$$E_{kin} = N k T , \quad (6)$$

siendo  $N$  el número de partículas.

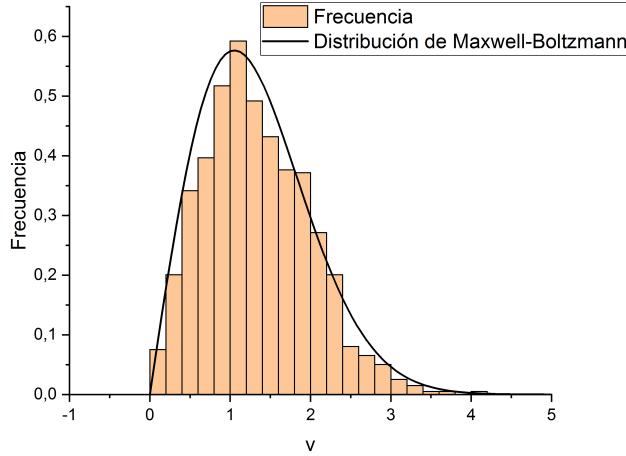


Figura 4: Histograma de la distribución del módulo de la velocidad de las partículas a tiempo final ( $t = 2000 h$ ) normalizado por el área. Se muestra también el gráfico correspondiente a la distribución de Maxwell-Boltzmann.

En la Fig. 4 se muestra el gráfico de la función dada por la Ec. 5 superpuesto al histograma del módulo de la velocidad a tiempo final. Se ve entonces que la distribución de velocidades alcanzada en la simulación se corresponde con la distribución de Maxwell-Boltzmann dada por la Ec. 5.

## 4. Conclusiones

Mediante una simulación computacional se estudió un sistema de partículas encerradas en una caja bidimensional y que interaccionan con un potencial del tipo Lennard-Jones. Se encontró que las energías cinética y potencial del sistema alcanzan un valor estacionario y las distribuciones de velocidad en cada dirección toman una forma gaussiana alrededor del cero. Además se corroboró que la distribución del módulo de la velocidad de las partículas sigue la distribución de Maxwell-Boltzmann.

## Referencias

- [1] Karplus, M., & Petsko, G. A. (1990). *Molecular dynamics simulations in biology*. Nature, 347(6294), 631–639.
- [2] Abramson, G. (2020). *Física computacional - Notas de clase*. Versión 25 de octubre de 2021. Instituto Balseiro, UNCUYO - CNEA. pp 123-134.