



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA



Facultad de Ciencias

# Física Computacional

## **Voluntario 1:** Simulación con dinámica molecular de un gas con un potencial de Lennard-Jones

### **Resumen**

En este informe tenemos como objetivo estudiar el comportamiento de un sistema que interactúan mediante un potencial de Lennard-Jones. Principalmente se estudiará la distribución de velocidades de las partículas, la ecuación de estado y la transición de fase.

Zhuo Zhuo Liu

**Grado en Física**

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Planteamiento del problema</b>	<b>1</b>
2.1. Condiciones iniciales . . . . .	1
2.2. Condiciones de contorno . . . . .	1
2.3. Potencial Lennard-Jones . . . . .	2
2.4. Algoritmo de Verlet . . . . .	2
2.5. Unidades empleadas . . . . .	2
<b>3. Análisis de Resultados</b>	<b>3</b>
3.1. Comparación con la distribución de Maxwell-Boltzmann . . . . .	3
3.2. Ecuación de estado . . . . .	4
3.3. Transición de fase sólido-líquido . . . . .	4
<b>A. Tabla de valores</b>	<b>5</b>
<b>B. Análisis de errores</b>	<b>6</b>

## 1. Introducción

## 2. Planteamiento del problema

Para poder

### 2.1. Condiciones iniciales

Al introducir las condiciones iniciales del sistema, debemos de tener cuidado de no colocar 2 partículas muy cercas entre ellas inicialmente, ya que puede provocar que las partículas adquieran mucha velocidad.

Para ello consideramos una cuadrícula separada por una distancia  $L/5$  en ambos ejes, y permitimos que las partículas se desplace una distancia aleatoria entre 0 y 1 de dicha posición. Y una velocidad con dirección aleatoria, pero con módulo unidad.

### 2.2. Condiciones de contorno

Para introducir la condición de contorno bidimensional periódica empleamos 2 funciones, una para la posición de las partículas, y la otra para la distancia entre partículas. Pero ambos seguirán la misma lógica.

Comenzando para la posición de las partículas, se tiene que si una partícula en su nueva posición tiene una coordenada mayor que  $L$  o menor que 0, entonces se le restará o sumará  $L$  a dicha coordenada dependiendo del caso.

Mientras que para la distancia entre partículas, se tiene que si la distancia entre partículas en una de las coordenadas es mayor que  $L/2$ , entonces se le restará  $L$  a la distancia. Y aplicando lo mismo al caso contrario, cuando la distancia es menor que  $-L/2$ .

Notar que se ha tenido que diferenciar en 2 funciones muy similares, pero con diferentes condiciones, ya que el sistema no está centrado en 0. Si se hubiera centrado en 0, ambas funciones serían iguales.

Una vez tenida estas condiciones, ya podemos calcular la distancia entre partículas, estas distancias será importantes tanto para calcular las fuerzas de interacción, como la energía potencial del sistema.

Guardaremos estas distancias o mejor dicho los vectores que las unen en una matriz de dimensiones  $N \times N \times 2$ , donde  $N$  es el número de partículas, y 2 indica las dimensiones del espacio. El cálculo de estas distancias es sencillo, siendo la resta entre las posiciones de las partículas.

Podemos reducir el número de cálculos al notar que la matriz es antisimétrica, entonces el elemento  $R_{ij}$  es igual a  $-R_{ji}$ , por lo que solo necesitamos calcular menos de la mitad de la matriz, y asignar el valor correspondiente a los otros elementos.

### 2.3. Potencial Lennard-Jones

Una vez tenido las funciones para imponer la condición de contorno y el cálculo de las distancias entre partículas, podemos calcular la fuerza de interacción entre partículas por el potencial de Lennard-Jones.

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

donde se ha usado  $R$  en lugar de  $r$ , para coincidir en la notación empleada en el código.

Entonces la fuerza de interacción entre las partículas viene dado por:

$$\vec{F}(\vec{R}) = -4\epsilon \left[ 6 \left( \frac{\sigma}{R} \right)^7 - 12 \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{11} \right] \quad (2)$$

Para calcular la aceleración de la partícula, se suma la fuerza de interacción con todas las demás las partículas, y se divide por la masa.

Implementando en todo esto en la función que te devuelve la aceleración del sistema en función de la posición de las partículas.

### 2.4. Algoritmo de Verlet

Por último solo queda añadir una función que nos permita calcular la nueva posición de las partículas, y la nueva velocidad de las partículas. Para ello emplearemos el algoritmo de Verlet.

### 2.5. Unidades empleadas

### 3. Análisis de Resultados

#### 3.1. Comparación con la distribución de Maxwell-Boltzmann

Partiendo de las condiciones iniciales propuestas (20 átomos de Argón en una caja de  $L = 10$ , distribuida aleatoriamente, y velocidades de módulo 1 con dirección aleatoria), se ha simulado el experimento durante un tiempo  $t = 50$ , con un paso del tiempo  $\Delta t = 0.002$ . La evolución del sistema puede visualizarse en formato gif, en el propio repositorio ()

Representando la evolución de la energía cinética, potencial y total del sistema a lo largo del tiempo, se obtiene la figura 1.

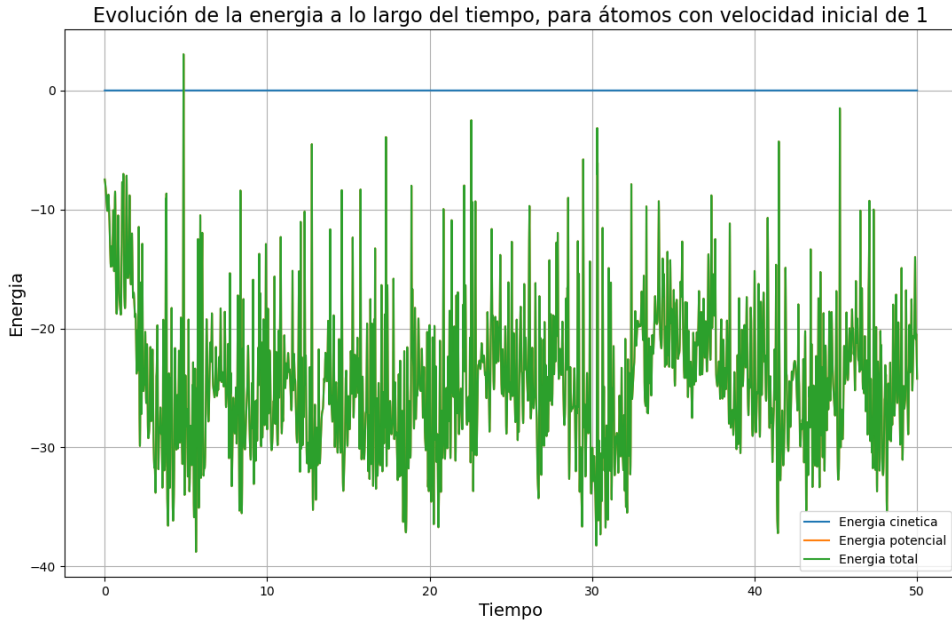


Figura 1: Evolución de las energías del sistema

Se observa como inicialmente la energía cinética aumenta rapidamente, mientras que la potencial disminuye al mismo ritmo

La temperatura se puede obtener por el teorema de equipartición:

$$k_B T = \frac{m}{2} \langle v_x^2 + v_y^2 \rangle \quad (3)$$

donde considerando que  $k_B = 1$ , y  $m = 1$ , se tiene que la temperatura es igual a  $T = 1$ .

Comparando la distribución de velocidades antes y despues de la relajación con la de Maxwell-Boltzmann. Inicialmente todas las partículas tienen la misma velocidad ( $v = 1$ ), por lo que la distribución de velocidades es una delta de Dirac.

### 3.2. Ecuación de estado

### 3.3. Transición de fase sólido-líquido

Para estudiar la transición de fase sólido-líquido, primero estudiaremos el estado sólido, para ello se ha empleado un sistema de 16 partículas en una caja de  $L = 4$ , con condiciones iniciales de una red cuadrada y en reposo. La idea es ver que el sistema evoluciona hasta un estado de equilibrio, donde se dispondrán en una estructura triangular.

De hecho este comportamiento se verificará para otras configuraciones iniciales, siempre que la temperatura del sistema sea lo suficientemente baja.

Entonces para ver la transición de fase, se irá aumentando la temperatura del sistema, es decir aumentando su velocidad en un factor 1.5 en los tiempos  $t = 20, 30, 35$  y  $45$ .

El proceso anterior está bien para observar el fenómeno de la transición de fase, sin embargo, para estimar la temperatura crítica, se ha de calentar el sistema más lentamente y dejando que el sistema se relaje.

## A. Tabla de valores

## B. Análisis de errores