



# Simulación de $N$ partículas en una caja con potencial de Lennard–Jones

Universidad Distrital Francisco José de Caldas  
Proyecto Curricular de Física

Mateo Maldonado  
20221107070

## 1. Introducción

El estudio de sistemas con muchas partículas confinadas en un espacio cerrado constituye una base fundamental en la física estadística y la termodinámica. En este proyecto se desarrolló una simulación en C++ que modela el movimiento de  $N$  partículas dentro de una caja de dimensiones  $W \times H$ , incluyendo interacciones entre ellas mediante el potencial de Lennard–Jones, colisiones con paredes y análisis estadístico del sistema.

## 2. Descripción del modelo

### 2.1. Estructura del código

El programa fue diseñado de forma modular y orientada a objetos. Las clases principales son:

- **Bola:** Modela cada partícula, con posición, velocidad, masa, radio e integrador Velocity Verlet.
- **Caja:** Define los límites del sistema y calcula rebotes contra las paredes.

Los datos de la simulación se almacenan en `results/datos.txt`, donde cada línea contiene posición, velocidad y energía instantánea.

### 3. Interacción entre partículas: Potencial de Lennard–Jones

El potencial de Lennard–Jones describe la interacción par a par entre las partículas:

$$V_{\text{LJ}}(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

donde:

- $\varepsilon$  controla la profundidad del pozo (intensidad de la interacción),
- $\sigma$  es la distancia característica a la cual el potencial cambia de repulsivo a atractivo.

La fuerza correspondiente es:

$$\vec{F}(r) = -\frac{dV}{dr}\hat{r} = 24\varepsilon \left[ 2 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \frac{1}{r^2} \vec{r}.$$

Esta fuerza se implementa directamente en la clase `Bola` para actualizar la aceleración de cada partícula.

### 4. Colisiones entre partículas

Cuando dos partículas se encuentran a una distancia menor que la suma de sus radios, se aplica un esquema de corrección geométrica más impulso elástico:

$$\hat{n} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}.$$

$$v_{\text{rel}} = (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \hat{n}.$$

$$\vec{J} = -(1 + e) \frac{v_{\text{rel}}}{m_i + m_j} \hat{n}, \quad e = 1.$$

### 5. Colisiones con las paredes

$$v'_x = -v_x \quad (\text{paredes verticales}), \quad v'_y = -v_y \quad (\text{paredes horizontales}).$$

### 6. Energía del sistema

La energía total por partícula incluye:

$$K = \frac{1}{2}mv^2, \quad U = \sum_{j \neq i} V_{\text{LJ}}(r_{ij}), \quad E = K + U.$$

En el marco del teorema del virial, se espera que:

$$\langle K \rangle = -\frac{1}{2} \left\langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \right\rangle.$$

## Gráfica de energías

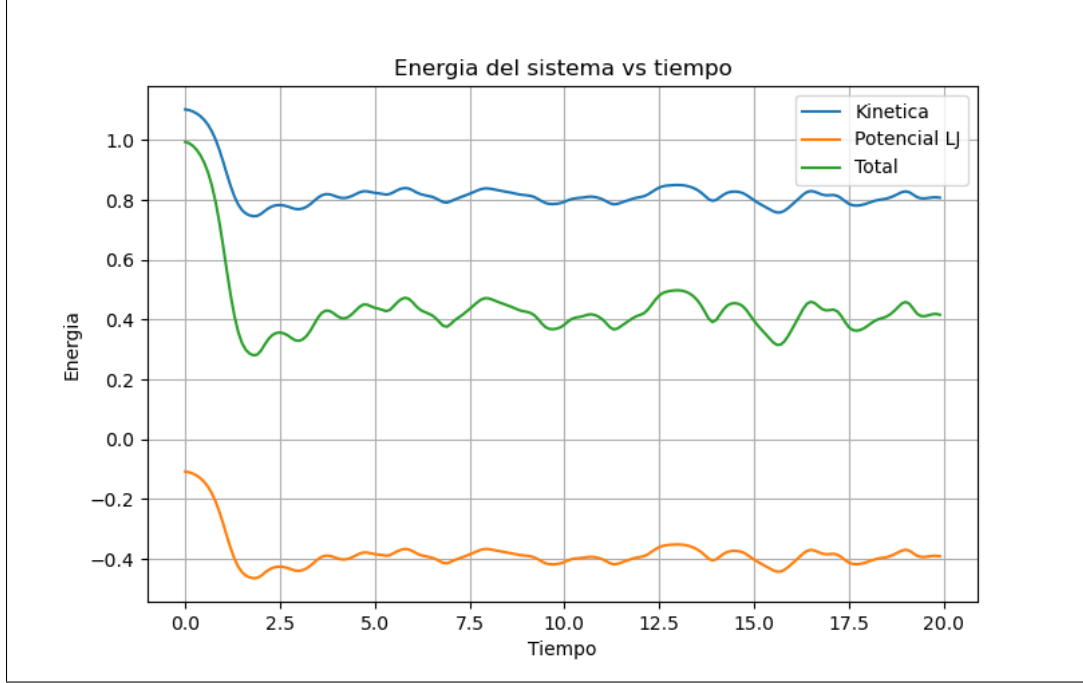


Figura 1: Energía cinética, potencial y total promediadas en el tiempo.

Las respectivas energías con estas condiciones son:

$$\langle K \rangle = 0,8206307578801549$$

$$\langle U \rangle = -0,3836183849084654$$

$$\langle E \rangle = 0,43701237297168966$$

## 7. Trayectorias de las partículas

La simulación registra la evolución espacial de todas las partículas en el tiempo.

## 8. Histogramas de velocidad

La distribución de velocidades se compara con la distribución de Maxwell–Boltzmann:

$$f(v) = Av \exp \left( -\frac{mv^2}{2k_B T} \right).$$

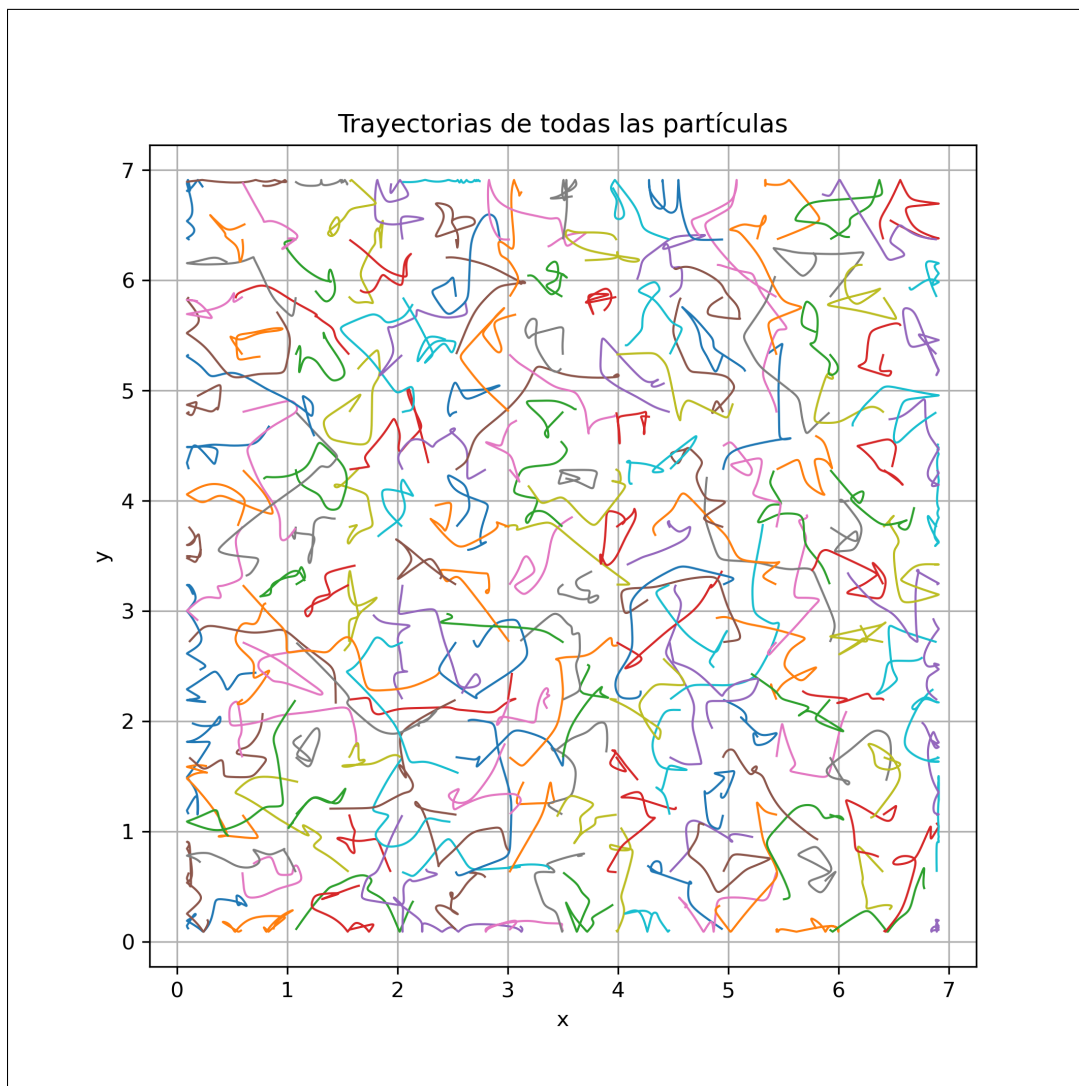


Figura 2: Trayectorias de todas las partículas dentro de la caja.

## 9. Conclusiones

La simulación reproduce propiedades estadísticas esperadas para un gas interactuante. El potencial de Lennard–Jones permite observar tanto repulsión a cortas distancias como atracción a distancias intermedias, lo cual afecta la energía del sistema y su distribución de velocidades. El análisis energético permite poner a prueba el teorema del virial y estudiar fenómenos emergentes propios de la física estadística de muchos cuerpos.

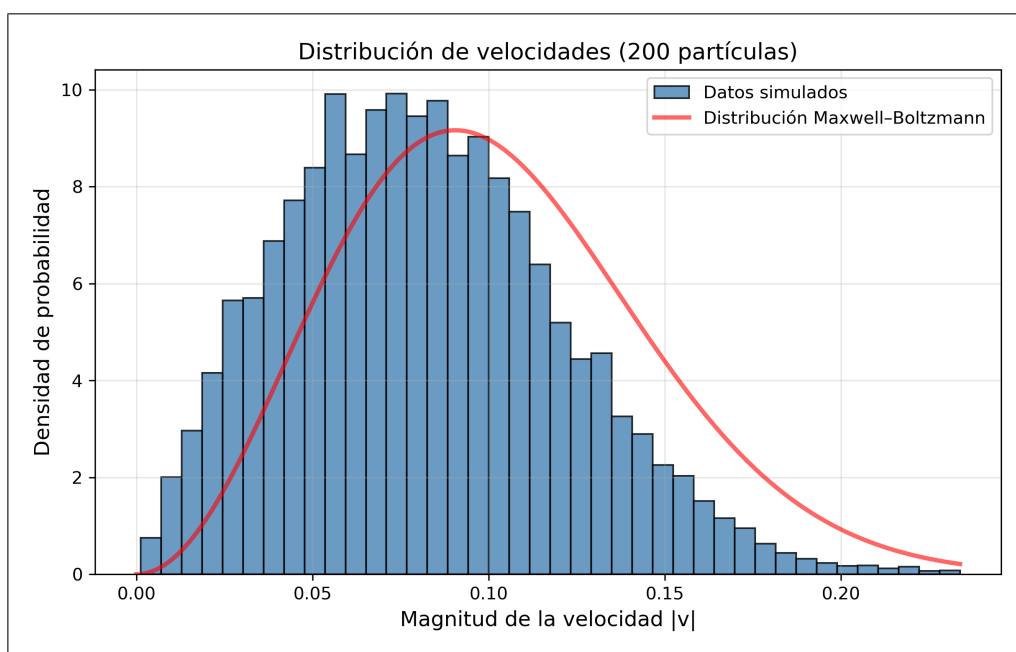


Figura 3: Histograma de velocidades y ajuste Maxwell-Boltzmann.