

# FISICA COMPUTACIONAL

## PRÁCTICA 6 - 2022

Entregar 28/06/20

### 1. Dinámica Browniana.

Escribir un programa que realice una simulación del tipo *Dinámica Browniana* de una suspensión de partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones:

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

Utilice la versión “truncada y desplazada” del potencial, con  $r_{cut} = 2.5\sigma$ , desprecie las interacciones hidrodinámicas entre las partículas y asuma que el coeficiente de difusión (de las partículas en el límite de densidad cero) es  $D_0 = \frac{kT}{3\pi\eta\sigma}$ . La ecuación de evolución para la partícula  $i$ , será entonces:

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \frac{\mathbf{f}_i(t)}{3\pi\eta\sigma} \Delta t + \mathbf{X}_i(\Delta t)$$

donde  $\mathbf{f}_i(t)$  es la fuerza sobre la partícula  $i$  debido a las demás partículas, y  $\mathbf{X}_i(\Delta t)$  (el desplazamiento Browniano) es una variable aleatoria Gaussiana, definida por:

$$\overline{\mathbf{X}_i(\Delta t)} = 0 \quad \text{y} \quad \overline{\mathbf{X}_i(\Delta t) \mathbf{X}_j(\Delta t)} = 2 D_0 \Delta t \delta_{ij} \delta(\Delta t) .$$

Inicialice el sistema colocando las partículas en una red SC (cúbica simple) y utilice al menos 256 partículas.

- Para una temperatura reducida,  $T^* = 1.1$ , densidad reducida,  $\rho^* = 0.8$ , y viscosidad reducida  $\eta^* = 2.87$ , calcule la función correlación de pares,  $g(r)$ , y el valor de la presión y energía del sistema. Compare resultados con los obtenidos usando dinámica molecular.
- Para el mismo sistema del item anterior, calcule el desplazamiento cuadrático medio y gráfiquelo en función de  $t/t_0$ , con  $t_0 = \sigma^2/D_0$ . Determine el coeficiente de difusión a tiempos largos,  $D/D_0$ .
- Obtenga y grafique el coeficiente de difusión a tiempos largos,  $D/D_0$ , para  $T^* = 1.1$  y  $\eta^* = 2.87$ , en función de  $\rho^*$ , en el rango  $\rho^* \in [0.2, 1.05]$ . Realice al menos 15 simulaciones