

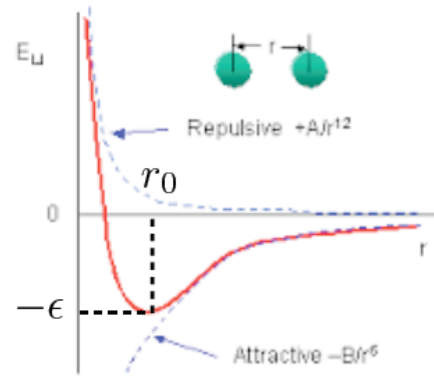
## MÉTODOS DE SIMULACIÓN – FÍSICA Taller 1, Ejercicio 4

### GAS DE LENNARD-JONES

El potencial de Lennard-Jones,

$$V(r) = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right],$$

es un modelo aproximado de la interacción entre moléculas no polares que combina una fuerza repulsiva de exclusión de Pauli (el término a la potencia 12) con una fuerza atractiva debida a fuerzas de van der Waals (el término a la potencia 6). El potencial presenta un valor mínimo  $-\varepsilon$  a una distancia  $r_0$ , que es la distancia de equilibrio (ver Figura). La fuerza derivada de este potencial,



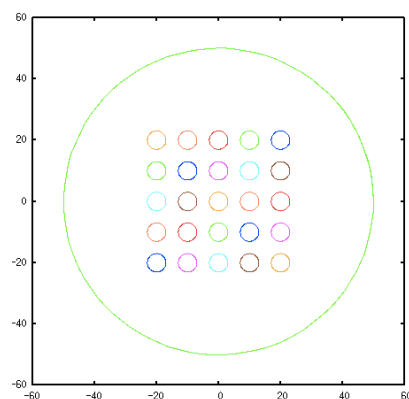
$$F(r) = \frac{12\varepsilon}{r} \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right],$$

es una fuerza restitutiva alrededor de  $r_0$ , que corresponde más o menos a la de un resorte que es difícil de comprimir, pero fácil de estirar.

- 1) Construya un programa que simule el movimiento de una partícula bidimensional de masa  $m$  bajo el influjo de una fuerza de Lennard-Jones, implementada como una fuerza central. Utilice  $m = 1.0$ ,  $R = 3.0$ ,  $\varepsilon = 1.0$  y  $r_0 = 10$ . Como condición inicial coloque la partícula en  $x = 10$ ,  $y = 0$ ,  $V_x = V_0$  y  $V_y = 0$ , con  $V_0 = \sqrt{k_B T / m}$ , donde  $k_B T = 1.0$  es la temperatura.
  - a. Observe cómo oscila.
  - b. Grafique  $x$  vs  $t$  para  $0 < t < 100$ , y cuadre el paso  $\Delta t$  para que la energía no crezca (esto se puede comprobar verificando que la curva no cambia si se hace  $\Delta t$  diez veces más pequeño).

De esta primera parte, presente:

- El programa .cpp o Phthon
  - La gráfica del punto 1b
- 2) Ahora el objetivo es construir un gas de partículas que interactúan por Lennard-Jones. Para eso, modifique el programa Gas2D visto en clase de la siguiente manera:
    - a. Modifique la fuerza entre moléculas para que sea la de Lennard-Jones, con los mismos parámetros del punto anterior.
    - b. Como condición inicial, coloque un cuadrado de  $5 \times 5$  partículas en las posiciones  $x = -20, -10, 0, 10, 20$  y  $y = -20, -$



- 10,0,10,20, con magnitud de velocidad inicial  $V_0 = \sqrt{k_B T / m}$ , como en el caso anterior, y dirección de la velocidad  $\theta$  escogida al azar entre 0 y  $2\pi$ .
- Quite los granos que hacen las veces de paredes. En su lugar, dibuje un círculo de radio  $R_{\text{pared}}=50$  centrado en el origen y añada una fuerza global de rebote ejercida por esa pared circular de la siguiente manera: si el grano de radio  $R$  penetra en la pared una distancia  $s$ , sentirá una fuerza de magnitud  $F = Ks$  en dirección hacia el origen, con  $K=10000$ .
  - Fije el paso de tiempo a  $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$ , el tiempo máximo de simulación en  $t_{\text{max}}=100$  y dibuje en la animación un total de 2000 cuadros.
  - Vea qué pasa si  $k_B T = 0.05$  (un sólido),  $k_B T = 0.5$  (un líquido), y  $k_B T = 10.0$  (un gas).

De esta segunda parte, presente:

- El programa .cpp o Python
  - Un .gif animado o un .mp4 de la simulación para cada uno de los estados: sólido, líquido y gas, a lo largo de un tiempo de simulación  $t_{\text{max}}=100$ .
  - Describa, además, lo que observa.
- 3) Ahora vamos a construir una función que mida de manera aproximada el tamaño ocupado por los  $N=25$  granos. Para ello, utilizaremos el radio de giro, que (como todas las masas son iguales) es dado por

$$R_{\text{giro}} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \|\vec{r}_i - \vec{r}_{\text{cm}}\|^2}$$

- Como primera parte de la función, calcule el vector posición  $\vec{r}_{\text{cm}}$  del centro de masa de todos los granos, como

$$\vec{r}_{\text{cm}} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \vec{r}_i$$

- Complete la función para que calcule y devuelva el valor  $R_{\text{giro}}$ .
- En el programa principal, deje de hacer la animación y en vez de ello imprima  $R_{\text{giro}}$  en función de  $t$ . Grafique en una sola figura  $R_{\text{giro}}$  en función de  $t$  para los casos de sólido, líquido y gas ( $0 \leq t \leq 100$ ).
- Calcule el valor promedio de  $R_{\text{giro}}$  desde  $t=20$  hasta  $t=100$  para los casos de sólido, líquido y gas. ¿Qué concluye de ello?

De esta tercera parte, presente:

- El programa .cpp o Python
- La gráfica de  $R_{\text{giro}}$  vs  $t$  para sólido, líquido y gas del punto c)
- Presente, además los valores promedio de  $R_{\text{giro}}$  para sólido, líquido y gas, y lo que concluye al analizar estos resultados.

## Referencias

- [1] [https://es.wikipedia.org/wiki/Potencial\\_de\\_Lennard-Jones](https://es.wikipedia.org/wiki/Potencial_de_Lennard-Jones)