

Métodos Computacionales en Nanomateriales

Dr. Elmer Cruz Mendoza
email: elmer.cruz.mendoza@gmail.com

9 de febrero de 2016

La presente práctica tiene como objetivo introducir al estudiante al mundo de los métodos computacionales aplicados a la ciencia. Se resolverán problemas básicos de mecánica clásica, en los que se estudiará la dinámica de una partícula utilizando una computadora. Los resultados así como los programas de cómputo contruidos serán útiles para entender problemas más complejos.

1. Partícula en una caja unidimensional

Considérese una partícula atrapada en una caja unidimensional, tal como se muestra en la figura 1. Dicha partícula se mueve libremente sobre el eje x , para $0 < x < L$. La energía potencial bajo la cual se efectúa el movimiento es

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ +\infty & \text{cualquier otro valor de } x \end{cases} \quad (1)$$

de manera que la fuerza definida como $F = -\frac{dV}{dx}$, será cero dentro de la caja y $F = \pm\infty$ en la posición de las paredes de la caja. Esto, ocasionará que la velocidad de la partícula cambie instantaneamente de signo cada que colisione con una pared.

A $t = t_0$, la partícula se encuentra caracterizada por la posición inicial $x = x_0$ y por la velocidad inicial v_0 . Estas, constituyen las condiciones iniciales del problema.

La dinámica estará descrita por las ecuaciones

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + v_0(t - t_0) \\ v(t) &= v_0 \text{ velocidad constante} \end{aligned} \quad (2)$$

- Contruyase un programa que permita calcular la posición de la partícula y su velocidad considerando los cambios en el signo de la velocidad debido a las colisiones con las paredes.
- obtenga resultados para $L = 10$ m, $x_0 = 0$ m, $v_0 = 2$ m/s, $t_0 = 0$ s, $t_f = 20$ s y $\delta t = 0,001$ s.
- Utilizar Gnuplot, OriginLab u otro programa para graficar la posición ($x(t)$) y la velocidad ($v(t)$), como función del tiempo.

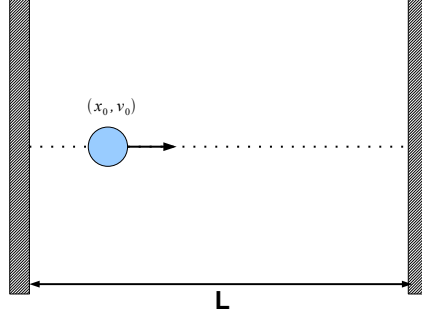


Figura 1: Pelota atrapada en una caja unidimensional.

- Discuta e interprete los resultados obtenidos
- Calcule $x(t)$ y $v(t)$ utilizando otros parámetros.

2. Partícula en una caja Bidimensional

Una partícula es confinada a moverse sobre un plano cuya área se encuentra definida por los lados $0 < x < L_x$ y $0 < y < L_y$ (ver figura 2). Cuando ésta choca con las fronteras, rebota elásticamente.

- Las colisiones de la partícula con las paredes de la caja se modelarán a través de la reflexión de la componente de velocidad normal a la superficie con la que interacciona¹.

La partícula comienza su movimiento a t_0 en (x_0, y_0) y a través de un programa computacional se debe calcular la trayectoria hasta un tiempo t_f , en donde es necesario tomar un paso de tiempo δt .

Si la posición y la velocidad de la partícula es conocida a un tiempo t , entonces a un tiempo $t + \delta t$ se tiene que:

$$\begin{aligned}
 x(t + \delta t) &= x(t) + v_x(t)\delta t \\
 y(t + \delta t) &= y(t) + v_y(t)\delta t \\
 v_x(t + \delta t) &= v_x(t) \\
 v_y(t + \delta t) &= v_y(t)
 \end{aligned} \tag{3}$$

¹Es decir, si la partícula choca con las paredes paralelas al eje y entonces cambiamos $v_x \rightarrow -v_x$; si choca con las paredes paralelas al eje x cambiamos $v_y \rightarrow -v_y$.

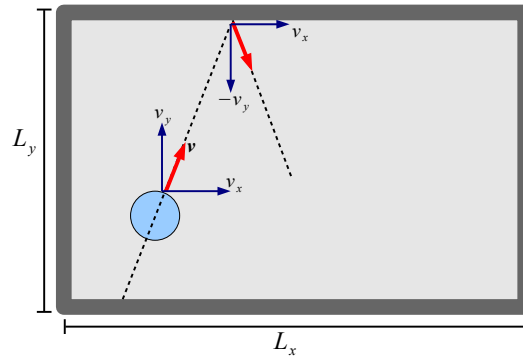


Figura 2: Partícula en una caja bidimensional.

- Modificar el programa de la partícula en 1D para el caso en 2D.
- Calcular las posiciones $x(t)$, $y(t)$ y las velocidades $v_x(t)$ y $v_y(t)$.
- Introducir un contador que registre las colisiones en la dirección x y otro para la dirección y .
- Graficar cada cantidad utilizando Gnuplot, Origin u cualquier otro programa de análisis de datos.
- Obtener la trayectoria de la partícula, es decir, graficar $x(t)$ Vs $y(t)$.
- Discutir los resultados

Nota: Escribir un reporte con formato de artículo científico, en el cual se exhiban los resultados y conclusiones de la práctica.