

Conservación de la energía

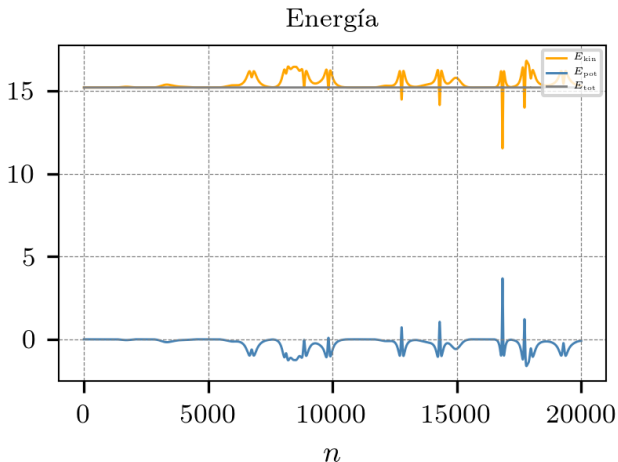


Figure: Energía cinética, potencial y total. Datos de la simulación:
 $L = 10$, $N = 8$, $h = 0.001$ ($T = 1.0$)

Diagrama de fases

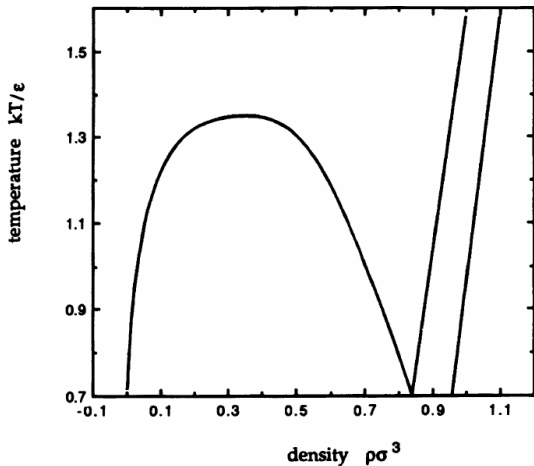


Figure: Diagrama de fases de Lennard-Jones (12,6). Fuente: Haile (1992)

Desplazamiento cuadrático medio

$$\Delta r^2(r) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [r_i(t) - r_i(0)]^2 \quad (1)$$

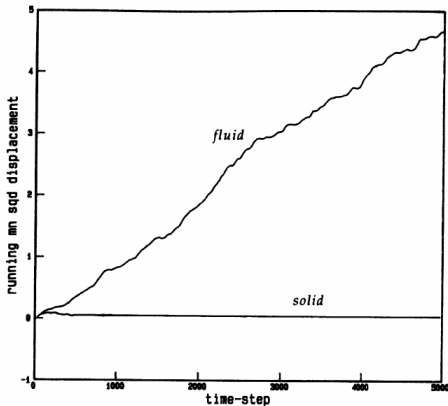


Figure: Desplazamiento cuadrático medio. $(\rho, T) = (0.9, 1.0)$ (líquido) y $(\rho, T) = (0.9, 0.8)$ (sólido). Fuente: Haile (1992)

Desplazamiento cuadrático medio

Estado $(\rho, T) = (0.1, 1.5)$ (gas) y $(\rho, T) = (0.75, 1.4)$ (líquido)

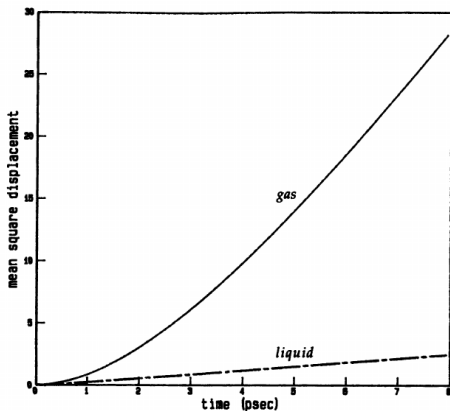


Figure: Desplazamiento cuadrático medio. Fuente: Haile (1992)

Función de distribución radial $g(r)$

Estado $(\rho, T) = (0.9, 1.0)$ (líquido) y $(\rho, T) = (0.9, 0.8)$ (meta-estable)

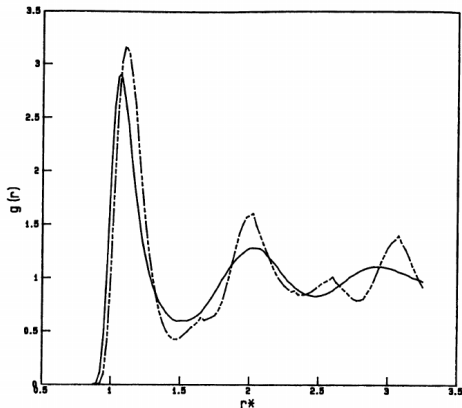


Figure: Función de distribución radial para un sistema meta-estable (línea de trazos) y líquido (línea continua). Fuente: Haile (1992)