

Dinámica molecular - 2° cuatrimestre 2014

Problema 1: gas de Lennard-Jones

Considere un sistema de 512 partículas que interactúan a través de un potencial del tipo Lennard-Jones, ubicadas inicialmente en una red cúbica simple. Confiera al sistema inicialmente una “temperatura” $T = 0.728$ y una densidad $\rho = 0.8442$. Deje evolucionar al sistema utilizando un algoritmo de dinámica molecular que genere estados en el ensamble microcanónico.

- (a) Grafique la evolución de la energía total, la energía cinética y la potencial del sistema ¿En cuánto estima el tiempo de termalización?
- (b) Estime las fluctuaciones, en el equilibrio, que presentan las cantidades estudiadas en el punto anterior. Tenga en cuenta que configuraciones sucesivas pueden presentar cierto grado de correlación.
- (c) Repita los puntos anteriores para diferentes “temperaturas” iniciales de manera de obtener diferentes temperaturas de equilibrio. Estudie el comportamiento de la energía total en función de la temperatura de equilibrio $E(T)$. Estime C_V a partir de esta curva y compárelo con el valor de C_V calculado a partir de fluctuaciones de las cantidades apropiadas en un ensamble microcanónico.

Problema 2: transiciones de fase

Encuentre la dependencia de la energía total E y la presión P con la temperatura T para un sistema de 125 partículas Lennard-Jones, para el rango de temperaturas $T \in [0.4, 2.0]$ y para un rango de densidades $\rho \in [0.4, 0.8]$. Utilice para ello el método de *rescaling* de velocidades. Asegúrese de tomar las mediciones una vez que la muestra haya termalizado en cada caso. ¿Cómo cambian los resultados si se utilizan 512 partículas?

Problema 3: función de distribución radial

Calcule la función de distribución radial $g(r)$ para el sistema del punto anterior, a temperatura $T = 1.5$ y $\rho = 0.6, 0.8$ y 1.0. Explique el comportamiento cualitativo observado.