

## EJERCICIOS: GUIA 3

### MD simulation of a LJ gas in a slab between two 93-walls.

El ejercicio consiste en obtener por simulacion MD la energia de interaccion de un gas LJ con las paredes 93.

**Se debe obtener la energia de interaccion con las paredes POR PARTICULA, y comparar con el valor del minimo del potencial 93 (-D).** Analizar el resultado: que porcentaje de monocapa se ha adsorbido? Como depende de la temperatura o de D?

**Guia:** El programa principal, subrutinas y archivos de datos se obtienen en la pagina de la materia.

Como primer paso, correr la simulacion sin modificaciones y obtener la presion para  $T=2$  y  $\rho=0.8$ . Comparar con el caso MC (guia 2) ( $P \sim 5$ )

Una vez confirmado el caso LJ sin paredes, modificar el programa para incluir la interaccion con las paredes (fuerza 93). Esto incluye modificar los siguientes archivos:

1. Archivo de datos "FORT.15" donde se deben entrar los parametros del potencial 93 ( $z_{min}$ , D,  $z_w$ )
2. Subrutina INIT.f, donde se lee el archive FORT.15, y se calcula C3.
3. Subrutina FORCE.f, donde se debe agregar el calculo de la energia Ewall
4. Subrutina SOLVE.f, donde se agrega la fuerza 93 para cada particula "i".
5. Subrutina SAMPLE.f, donde se escriben los resultados en el archivo "FORT.66"
6. Programa principal MD.f, donde se llama la subrutina SAMPLE.f
7. Incluir un nuevo archivo "wall.inc" similar a los otros archivos \*.inc donde se declaran los parametros  $c3$ , D,  $z_w$  para ser usados en las subrutinas (via `common/wall/c3,D,zw`).

Pueden consultar los apuntes de la teorica "Case Study 4".