

TRABAJO PRACTICO FINAL

SIMULACION NUMERICA DE ADSORCION EN PAREDES LJ

El objetivo de este trabajo es diseñar un “experimento” numerico para estudiar el fenomeno de adsorcion. Se debe usar el programa de simulacion MD LAMMPS.

El experimento debe incluir lo siguiente:

Equilibrar un vapor con paredes reflectivas

Adsorber en una pared

Adsorber en dos paredes

Desorber

Probar variaciones de temperatura, densidad, intensidad del sustrato.

Obtener adsorcion de multicapas y monocapa.

Calcular la energia de interaccion con la pared.

El reporte se expondra oral en el ultimo dia de clase, jueves 24 de Octubre.

Deben mostrar los resultados y los scripts.

Pueden traer una laptop o enviarme la presentacion en ppt o pdf. (limite de tiempo es 20 minutos)