Introducción a las simulaciones computacionales
Tarea Dinámica Molecular-1 — Entrega 15 de octubre de 2015

Profesor: Rodrigo Soto
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

1. Modifique el programa `TareaIII-1.c` que está en U-Cursos, el que simula un conjunto de partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones, de manera que

a) Mida correctamente la energía cinética promedio por partícula en la rutina `MideEkin`

$$K = \frac{1}{2N} \sum_i m v_i^2$$

No se preocupe del hecho que las velocidades están definidas en tiempos semienteros.

b) Modifique la rutina `ZeroVels` para que cada vez que sea llamada las velocidades se rescalen en un factor λ :
 $v_i \rightarrow \lambda v_i$

Corra simulaciones y visualicelas con el programa `visualiza` en `Processing` en las siguientes condiciones

a) Corra con $\lambda = 1$ y grafique la energía cinética en función del tiempo. Explique el resultado.

b) Corra con $\lambda = 1.1$ y grafique una configuración del sistema cuando $K \gg 1$. Interprete la configuración obtenida.

c) Corra con $\lambda = 0.9$ y grafique una configuración del sistema cuando $K \sim 1$ y $K \ll 1$. Interprete las configuraciones obtenidas.