

## Introducción a las simulaciones computacionales

### Tarea Dinámica Molecular-2 — Entrega 22 de octubre de 2015

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

1. Tome el programa TareaMD-1.c que Ud ya modificó en la Tarea 1 y agregue lo siguiente:

- a) Elimine el potencial confinante.
- b) Elimine la llamada a la rutina `ZeroVels`.
- c) Incorpore un termostato de reescalamiento de velocidades que sea invocado cada 100 iteraciones que mantenga una temperatura constante  $T_1$ .
- d) Ponga condiciones de borde periódicas en  $x$  y paredes duras en  $y$ .
- e) Ponga una condición inicial térmica con velocidades maxwellianas a temperatura  $T_0$ .

Use una caja de largo  $L = 30\sigma$ , definida entre  $-L/2$  y  $L/2$ . Inicialise con  $T_0 = 1.0$ .

Corra simulaciones y visualícelas con el programa `visualiza2` en `Processing` en las siguientes condiciones

- a) Corra con  $T_1 = 0.5$  y  $N = 700$ . Grafique la energía cinética en función del tiempo. Verifique que el termostato hace su trabajo.
- b) Corra con  $T_1 = 0.4$  y  $N = 100$  hasta por lo menos  $t = 100$ . Grafique una configuración e indique el tipo de dinámica que observa.
- c) Corra con  $T_1 = 5.0$  y  $N = 100$  hasta por lo menos  $t = 100$ . Grafique una configuración e indique el tipo de dinámica que observa.
- d) Corra con  $T_1 = 0.1$  y  $N = 100$  hasta por lo menos  $t = 100$ . Grafique una configuración e indique el tipo de dinámica que observa.

**Notas:** (1) Cuando  $T=5.0$ , puede ser necesario que disminuyan el paso del tiempo a  $dt=0.001$  El valor anterior puede ser muy grande y las partículas se pueden traslapar.

(2) En la CI dice que las partículas están separadas en 1.5 diámetros inicialmente. Así no caben las 700 partículas. Cambie el 1.5 por 1.15.