

Introducción a las simulaciones computacionales
Tarea Dinámica Molecular-3 — Entrega 29 de octubre de 2015

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

1. Se busca que ahora simulen un mezcla binaria que interactúa con los potenciales

$$U_{AA}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

$$U_{BB}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

$$U_{AB}(r) = 3\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3)$$

$$(4)$$

Es decir, las partículas iguales se atraen más que las partículas diferentes. Uds deben encontrar a qué temperatura se produce la transición separación-mezcla entre las dos componentes.

Para eso

- a) Tome su programa de la Tarea 2, manteniendo el termostato, la CI y las CB.
- b) Agregue un arreglo Tipo de tipo entero que valga 1 o 2 dependiendo del tipo de partículas. Asigne el tipo de manera aleatoria al inicio.
- c) Considere una caja de $L = 30\sigma$ y tome $N_A = N_B = 300$ partículas.
- d) Simule por tiempos largos (hasta $t = 1000$), para lo cual puede querer modificar su programa para que no grabe configuraciones tan seguido.
- e) Use `visualiza3.pde` para Processing.
- f) Corra simulaciones con varios T entre 0.2 y 1.0 mirando la configuración final.
- g) Grafique la configuración final para cada temperatura simulada e indique si Ud considera que hay segregación o no.

Para medir de una manera más cuantitativa, se puede hacer lo siguiente. Cada cierto número de iteraciones (por ejemplo 1000) se cuenta para cada partícula de tipo A cuantos vecinos de tipo A (N_{AA}) y cuantos vecinos de tipo B (N_{AB}) tiene. Para eso definimos un vecino como una partícula que está a una distancia menor a 2.5σ , usando la convención de imagen mínima.

Promedie los últimos valores de N_{AA} y N_{AB} (para eliminar el transiente) y grafique en función de la temperatura. Concluya.