

## *Reporte de resultados durante el semestre*

*Francisco Vazquez-Tavares*

*June 11, 2025*

### *Resumen de actividades*

Durante el semestre se trabajó principalmente en realizar correcciones al protocolo de simulaciones y realizar simulaciones de prueba con el protocolo correguido. Las principales correcciones que se realizaron fueron:

1. Correguir la implementación del potencial de 3 cuerpos en LAMMPS
2. Cambiar el comando `write_data` por el comando `restart`.
3. Adaptar el promedio temporal de los comandos `fix` para los observables de energía y estrés.
4. Corrección en el cálculo de densidad de empaquetamiento de las simulaciones.

Por otro lado las simulaciones de pruebas fueron realizandose para ir monitoreando que las comabios realizados no alteraran significativamente el comportamiento cualitativo esperado de las relaciones entre deformación y estrés. Una vez que se implementaron todas las correcciones, se empezaron a realizar simulaciones de exploración de parametros con el objetivo de ir analizando el sistema. Se vario el ritmo de deformación y el damp.

### *Resultados principales*

Los resultados principales del semestre son la relación preliminar entre el ritmo de deformación con el estrés en estado estacionario durante una deformación de cizallamiento (figura 1) y la evolución del estrés virial durante una deformación de cizallamiento (figura 2), junto con las correcciones realizadas en el protocolo de simulación.

### *Resultados generales*

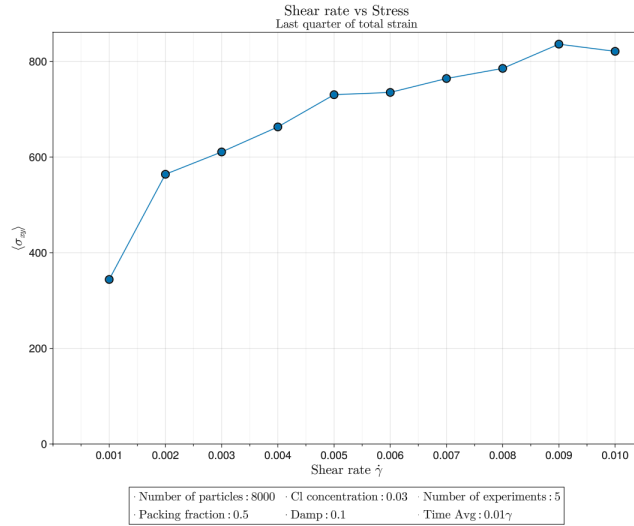


Figure 1: Promedio temporal del estrés en estado estacionario para distintos ritmos de deformación.

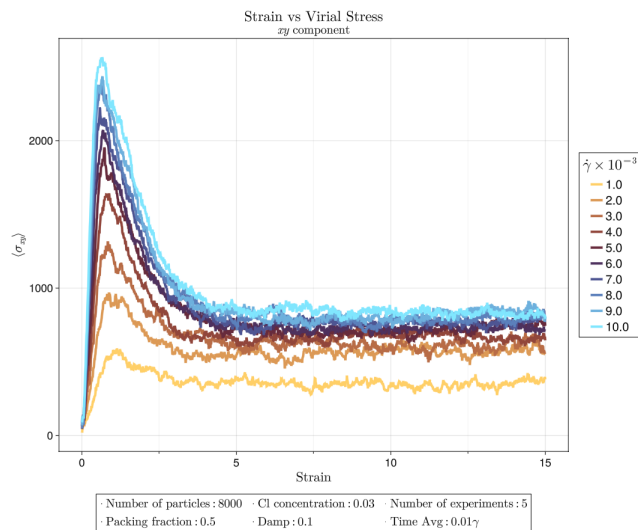


Figure 2: Promedio temporal del estrés virial durante una deformación de tipo cizallamiento para distintos ritmos de deformación.