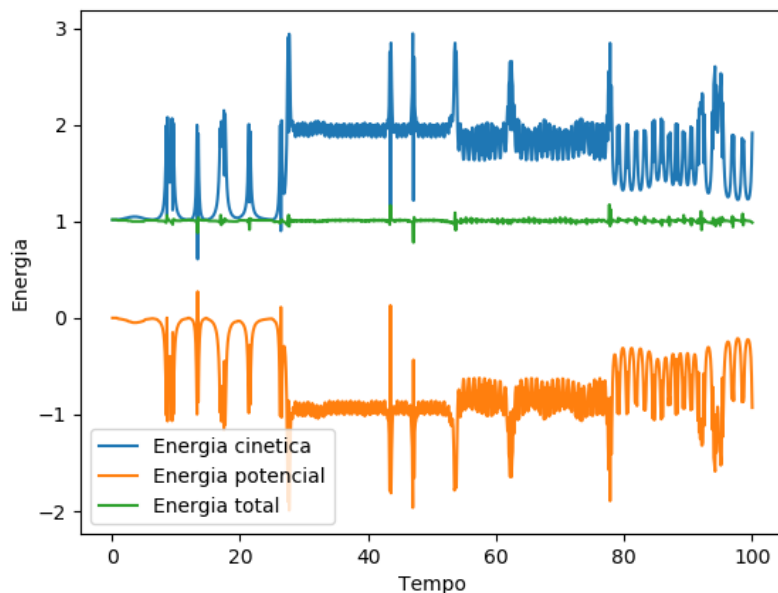


FÍSICA COMPUTACIONAL II

PROJETO: DINÂMICA MOLECULAR - Prazo de entrega: 26/04

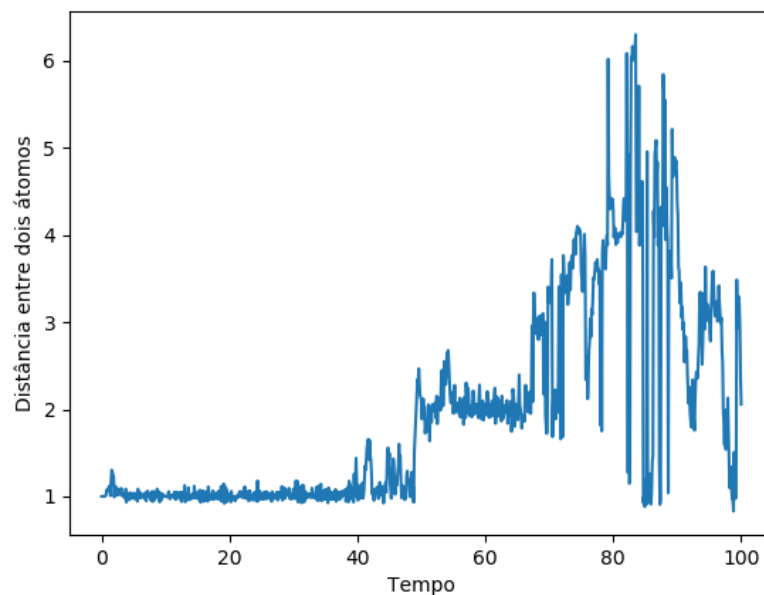
A ideia deste projeto é estender o código passado na aula anterior, e usar ele para estudar dois problemas simples. O código usado para resolver os problemas deve ser entregue junto com uma discussão dos resultados obtidos, que pode ser feita num arquivo a parte (preferencialmente) ou via comentários dentro do código. O primeiro e o segundo problemas foram tirados do livro do Giordano, que é uma boa fonte de consulta para esta parte. A terceira parte é baseada num exercício do Rubin Landau. Os três problemas são independentes, então se encontrar dificuldade na resolução de um deles passe para o seguinte. Vocês podem me procurar em minha sala caso tenham alguma dúvida.

Parte 1: Implemente o cálculo da energia cinética, potencial e total no programa. Você deve obter no final um gráfico similar ao mostrado abaixo se usar os parâmetros do arquivo disponibilizado no SIGAA. (Dica: Calcule primeiro a energia cinética. Calcular a energia potencial é mais trabalhoso, pois as vezes a menor distância entre duas partículas é encontrada medindo através da fronteira periódica. A rotina 'calcforces()' pode ser útil como modelo, mas repare que nela é usado um loop simples, e para calcular a energia potencial deve ser feito um loop duplo. Note no gráfico abaixo que a energia total é aproximadamente conservada, e esta informação pode ser útil para remover eventuais 'bugs' na implementação do cálculo da energia potencial.) (Dica2: Defina um outro arquivo de saída para armazenar as energias, e use a rotina 'dump()' como modelo de como formatar uma linha de output.)



Parte 2: Simule o processo de derretimento de um sólido. O primeiro passo a ser tomado é encontrar um regime em que os átomos de argônio formam um sólido. Para isto, aumente a

densidade e/ou reduza a velocidade dos átomos (caso você já tenha implementado o cálculo da energia, tente encontrar um regime com energia total negativa). Note que, em um sólido, se escolhermos um átomo veremos que os átomos em seu entorno se mantêm constantes (ou mudam bem pouco). Use este fato para estabelecer que o sistema se encontra no estado sólido. Em seguida, aumente a velocidade (e, conseqüentemente, a temperatura) para que o sistema derreta. Idealmente, você aumentará gradualmente a velocidade durante a simulação (instruções podem ser encontradas no Giordano). Mas, caso não consiga, você pode rodar diversas simulações variando a velocidade inicial. O gráfico abaixo mostra a distância entre dois átomos, em uma simulação em que a temperatura foi aumentada gradualmente; observe que houve um rearranjo no sistema pouco antes de $t=50$, mas que o sistema se estabilizou logo depois. Em torno de $t=70$ a distância começa a mudar rapidamente, indicando que o sólido derreteu.



Parte 3: Simule a colisão de um átomo de Argônio com um sólido. Gere uma estrutura inicial similar a mostrada abaixo, teste várias velocidades iniciais para o átomo isolado, e discuta os resultados obtidos. Você também pode variar o ângulo e a posição com que o átomo incide na estrutura.

