

# Simulación en física de materiales

Daniel Vazquez Lago

6 de noviembre de 2024

## Índice

<b>1. Objetivos</b>	<b>2</b>
<b>2. Teoría</b>	<b>2</b>
2.1. Distribución radial . . . . .	2
2.2. Propiedades dinámicas: coeficientes de difusión . . . . .	2
2.2.1. Correlación de velocidad . . . . .	2
2.2.2. Desplazamiento cuadrático medio . . . . .	2
<b>3. Resultados</b>	<b>2</b>

## 1. Objetivos

[1].

## 2. Teoría

### 2.1. Distribución radial

### 2.2. Propiedades dinámicas: coeficientes de difusión

#### 2.2.1. Correlación de velocidad

#### 2.2.2. Desplazamiento cuadrático medio

## 3. Resultados

$D_{dcm}$	$s(D_{dcm})$	$D_{Corrv}$	$s(D_{Corrv})$
0.3122	0.0047	0.3229	0.0051

Tabla 1: Valores del coeficiente de difusión medio e incertidumbre de la media para cada método.

## Referencias

[1] J. M. Haile. *Molecular Dynamics Simulation*.

$D_{dcn}$	$D_{Corrv}$
0.3104	0.3217
0.3195	0.3304
0.3131	0.3247
0.3166	0.3280
0.3048	0.3151
0.3103	0.3197
0.3135	0.3234
0.3152	0.3262
0.3066	0.3166

Tabla 2: Valores del coeficiente de difusión para cada “medida”.

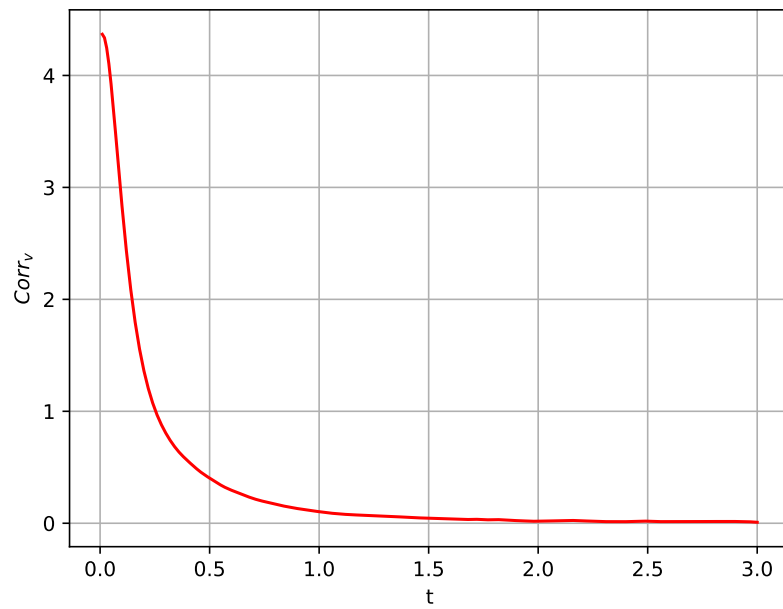


Figura 1: Gráfico de correlación de la velocidad con el tiempo.

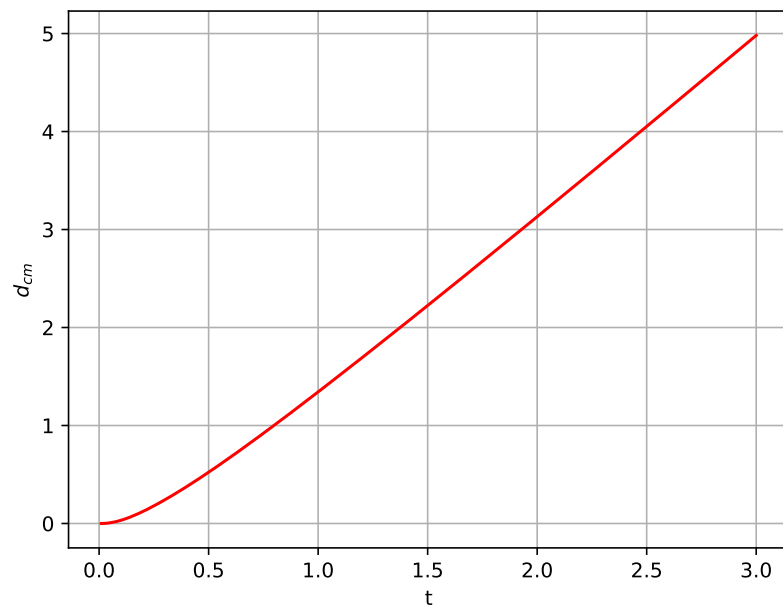


Figura 2: Gráfico del desplazamiento cuadrático medio con el tiempo.

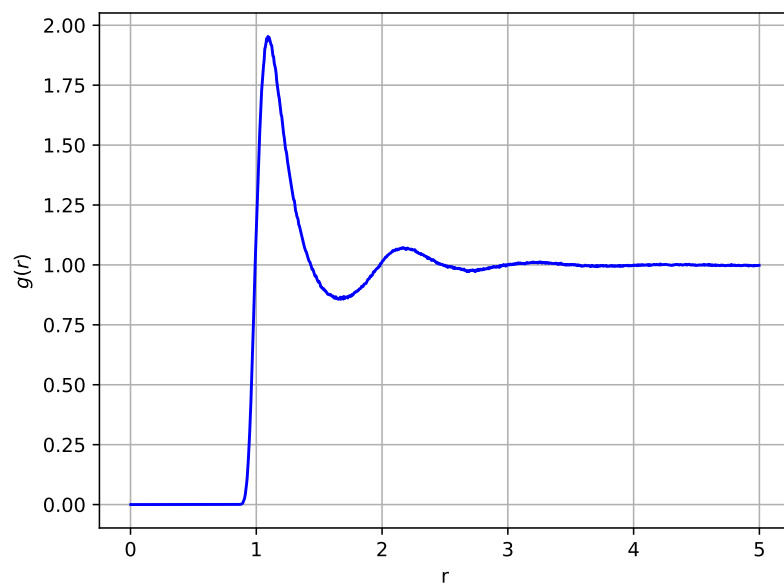


Figura 3: Gráfico de la distribución radial