

Simulación en física de materiales

Daniel Vazquez Lago

6 de noviembre de 2024

Índice

1. Objetivos	2
2. Teoría	2
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
3. Resultados	2

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	0.0031	0.3229	0.0034

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”.

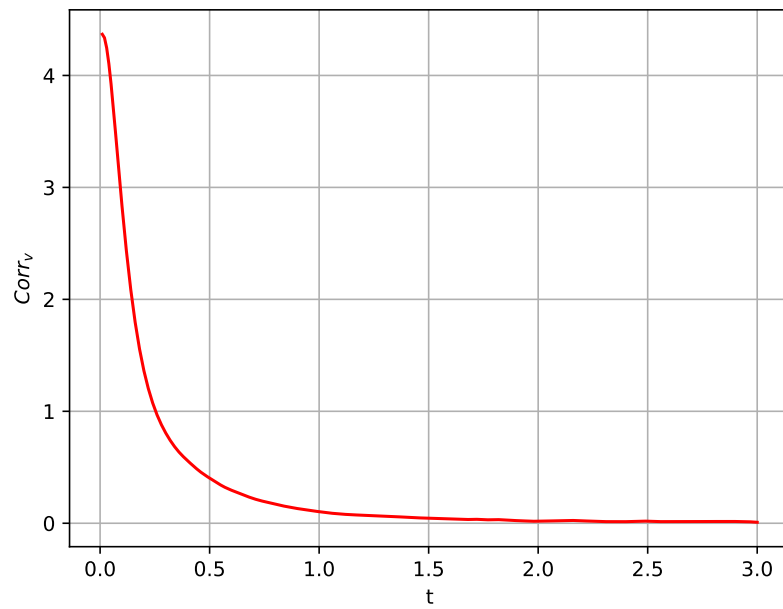


Figura 1: Gráfico de correlación de la velocidad con el tiempo.

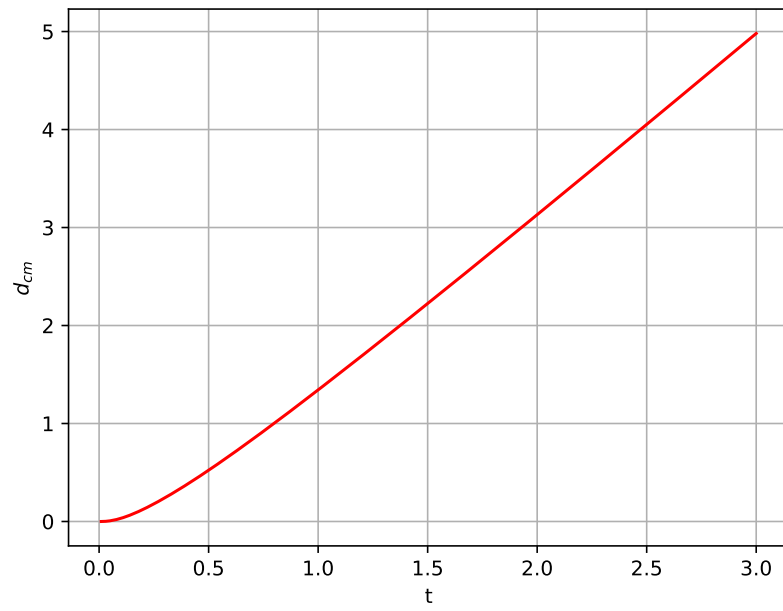


Figura 2: Gráfico del desplazamiento cuadrático medio con el tiempo.

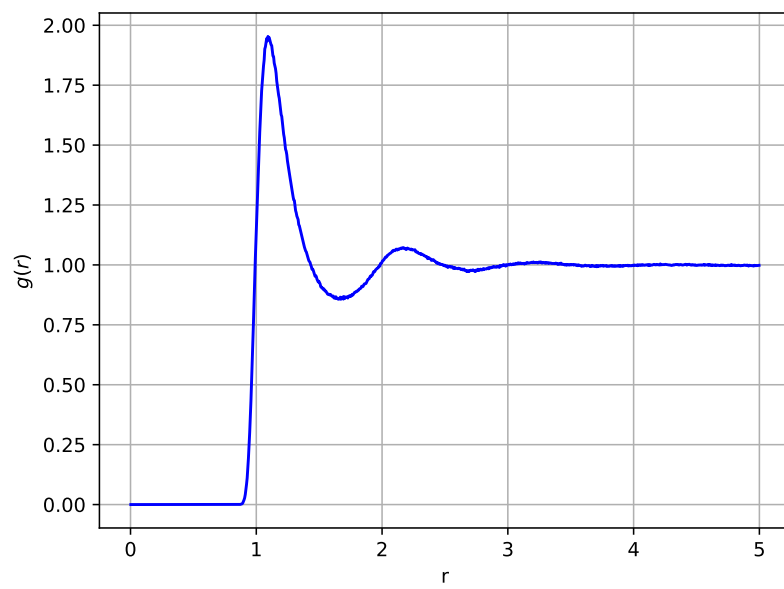


Figura 3: Gráfico de la distribución radial