

# Simulación en física de materiales

Daniel Vazquez Lago

28 de octubre de 2024

# Índice

## 1. Objetivos

2

## 1. Objetivos

- Hay que hablar de las variables reducidas.

$$\frac{kT}{\varepsilon} = T^* = \frac{2\bar{E}_{cin}^*}{\nu} = \frac{2\bar{E}_{cin}/\varepsilon}{\nu} \quad (1)$$

$$C_V^* = \frac{C_V}{k} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\nu}{2} - 1\right) \langle E_c \rangle^* \langle E_c^{-1} \rangle^*} \quad (2)$$

$$P^* = \frac{P}{\varepsilon \sigma^3} = \frac{NKT^*}{V^*} - \langle \varphi_V \rangle^* = \frac{N^* \frac{kT}{\varepsilon}}{\frac{V}{\sigma^3}} - \langle \varphi_V \rangle^* \quad (3)$$

$$\alpha_E^* = \frac{\alpha_E}{k/\varepsilon} = \frac{k}{V^* \left[ \left(1 - \frac{\nu}{2}\right) \langle E_c \rangle^* \langle \varphi E_c^{-1} \rangle^* - \langle \varphi_V \rangle^* \right]} \quad (4)$$

La gamma de Brunesen

$$\gamma = \frac{NK}{C_V} + V \left( \frac{\nu}{2} - 1 \right) \left[ \langle \varphi_V \rangle \langle E_c^{-1} \rangle - \langle \varphi_V E_C^{-1} \rangle \right] \rightarrow \quad (5)$$

$$\gamma = \gamma^* = \frac{N}{C_V/k} + \frac{V}{\sigma^3} \left( \frac{\nu}{2} - 1 \right) \left[ \langle \varphi_V \rangle \langle E_c^{-1} \rangle - \langle \varphi_V E_C^{-1} \rangle \right] \sigma^3 \cdot \frac{1}{\sigma^3} = \quad (6)$$

$$\frac{N}{C_V^*} + V^* \left( \frac{\nu}{2} - 1 \right) \left[ \langle \varphi_V \rangle^* \langle E_c^{-1} \rangle^* - \langle \varphi_V E_C^{-1} \rangle^* \right] \quad (7)$$

El valor de  $k_s$  tiene un valor (modulo de ks)

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_s} = & \frac{NkT}{V} \left[ 1 + 2\gamma - \frac{Nk}{C_V} \right] + V \langle \varphi_{VV} \rangle \\ & - V \left( \frac{\nu}{2} - 1 \right) \left[ \langle \varphi_V^2 E_c^{-1} \rangle - 2 \langle \varphi_V \rangle^2 \langle \varphi_V E_c^{-1} \rangle + \langle \varphi_V \rangle^2 \langle E^{-1} \rangle \right] \end{aligned} \quad (8)$$

- Hay que guardar también la cinética total y la potencial total (media).
- La incertidumbre se cacula a partir de los valores medios (10 temperaturas, 10Cvs..) y los hacemos que sean experimentales. Entonces la sigma (debemos aplicar 2 sigma por recomendación, aunque 3 también esta bien, suponiendo que es gaussiano, aunque no lo sea). Mencionar t student, ver estadística.

## Referencias