

## GRADO EN FÍSICA, CURSO 2023-2024

### FÍSICA COMPUTACIONAL

#### Práctica de Ordenador - Bloque II - 3

##### Cálculo de energía total con un potencial de pares

El objetivo de esta práctica es escribir un programa que genere una red f.c.c. y calcule la energía total del sistema considerando un potencial de interacción de Lennard-Jones de la forma:

$$V(r) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^n - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^m \right) \quad (1)$$

con  $n = 12$  y  $m = 6$ , y parámetros  $\sigma = 2.3151\text{\AA}$  y  $\epsilon = 0.167\text{eV}$  correspondientes al cobre, con un parámetro de red de  $a = 3.603\text{\AA}$

Para ello, parte del programa de generación de una red cristalina y considera la red f.c.c. Implementa la función para el cálculo de la energía total del sistema como la suma de energías de cada par de átomos. Considera un radio de corte del potencial igual a 3 veces  $\sigma$ . Calcula la energía del sistema considerando superficies libres y con condiciones periódicas y compara los resultados.

El programa debe tener los siguientes datos de entrada:

1. Número de celdas unidad en la dirección x, y, z.
2. Condiciones periódicas o superficies libres.

Y los datos de salida deben ser, al menos, los siguientes:

1. Energía total del sistema por átomo.
2. Representación gráfica en 3 dimensiones de la red.

Compara la energía total por átomo para distintas dimensiones de la caja de simulación. Explica tus resultados.

Compara la energía total por átomo para el sistema con y sin condiciones periódicas y explica los resultados.

EXTRA: Representa con colores la energía potencial de cada átomo. Modifica el radio de corte del potencial, calcula de nuevo las energías y explica tus resultados.