

GRADO EN FÍSICA, CURSO 2023-2024  
FÍSICA COMPUTACIONAL

**Práctica de Ordenador - Bloque II - 4**

**Cálculo de la fuerza con un potencial de pares**

Esta práctica es la continuación de la práctica 3. En este caso además de calcular la energía del sistema, calcularemos la fuerza sobre cada partícula. La fuerza se calculará como el gradiente del potencial de interacción. Calcula el módulo de la fuerza sobre cada átomo. Representa los valores gráficamente o guárdalos en un fichero con los datos de cada átomo.

EXTRA-1: Introduce una distribución de velocidades aleatoria de manera que la temperatura total del sistema sea la que se indique como dato de entrada. Para ello realiza los siguientes pasos:

1. Introduce un parámetro de entrada que sea la temperatura (en K): Temp.
2. Genera un valor aleatorio entre -0.5 y 0.5 para cada partícula y para cada componente de cada partícula.
3. Calcula la temperatura del sistema de acuerdo a esta distribución de velocidades considerando que la temperatura viene dada por:

$$T_{random} = \frac{2}{3} \frac{E_c}{K_B N} \quad (1)$$

donde  $N$  es el número de partículas,  $K_B = 8.6181024 \times 10^{-5} eV/K$  es la constante de Boltzmann y  $E_c$  es la energía cinética. Para el cálculo de la energía cinética considera que la masa del cobre es 63.55 uma. Cuidado con las unidades: longitudes en Å y energías en eV.

4. Para que la temperatura sea la que queremos (Temp), se escalan las velocidades por un factor que ajuste la temperatura calculada con la de entrada:

$$sc = \sqrt{\frac{Temp}{T_{random}}} \quad (2)$$

5. Escalamos las velocidades multiplicando cada componente de cada partícula por el factor sc.
6. Volvemos a calcular la temperatura del sistema con la ecuación anterior y las nuevas velocidades. Imprimimos el valor de la temperatura para comprobar que es la que queríamos (Temp).

EXTRA-2: Implementa el algoritmo de Verlet para calcular la trayectoria de las partículas. Para ello, realiza los siguientes pasos:

1. Incluye un nuevo parámetro de entrada: el número total de pasos de simulación.
2. Utiliza como paso de tiempo  $h = 10^{-15}s$ .
3. Utiliza las velocidades del ejercicio extra anterior como velocidades iniciales.
4. Utiliza el mismo algoritmo de Verlet para calcular las nuevas posiciones y velocidades de las partículas.
5. Calcula la temperatura, la energía cinética y la energía potencial para cada paso de simulación. Para la energía potencial, considera la energía potencial con respecto al valor inicial.
6. Representa la temperatura en función del número de pasos de simulación.
7. Representa la energía cinética, la energía potencial (con respecto a la inicial) y la energía total en función del número de pasos de simulación.