

Tarea 4

DE2 (2021-1)

Objetivo

Implementar un código de simulación de Monte Carlo para el cálculo de las propiedades estructurales y termodinámicas de sistemas con modelos de interacción de potencial continuos siguientes

- I. Potencial Gaussiano (referencia 1)

$$u(r) = \varepsilon e^{-\kappa \left(\frac{r}{\sigma}\right)^2}$$

- II. Potencial de Potencia Inversa (referencia 2).

$$u(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^n$$

- III. Potencial de Lennard-Jones (referencia 3).

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$

- IV. Potencial Doble Gaussiana desplazada (referencia 4).

$$u(r) = \exp\{-r^2\} - \eta \exp\{-(r-3)^2\},$$

- V.- Parte repulsiva del Potencial DLVO (Yukawa)

$$\beta u(r) = K \frac{\exp(-\kappa r)}{r}$$

Actividades:

Partiendo de una configuración inicial regular o aleatoria, muestre los resultados que obtiene, tomando como base las referencias citadas que se le sugieren u otra que Usted seleccione sobre su sistema modelo. En el caso V tomar $K=580$ y $\kappa=0.149$ para una fracción de volumen de 4.4×10^{-4} .

En el reporte incluir en cada caso:

- a) Configuración inicial y final.
- b) Curva de termalización (energía potencial por partícula)
- c) Función de distribución radial.
- d) Valor promedio de la Energía Potencial del sistema.
- e) Valor promedio de la Presión del sistema.

Referencias:

- [1] Fluid and solid phases of the Gaussian core model. J. Phys.: Condens. Matter 12 (2000).
- [2] Comparison of structure and transport properties of concentrated hard and soft sphere fluids. J. Chem. Phys. 130, 174903 (2009).
- [3] Radial Distribution Functions and the Equation of State of Fluids Composed of Molecules Interacting According to the Lennard-Jones Potential . J. Chem. Phys. 20, 929 (1952).
- [4] Phase behavior near and beyond the thermodynamic stability threshold. PRE 92, 050301(R) (2015).

Distribucion de los casos:

- I.- Jesus Marcel, Rolando Abdel, Daniela, Vladimir.
- II.- Fatima Fernanda, Jose Daniel, Eduardo, Jesus Roberto.
- III.- Marco Antonio, Claudeth Clarissa, Antonio, Cesar Andres.
- IV.- Julio Cesar, Antonio Jose, Luis Alfonso.
- V.- Jesus Giovanni, Fidel Alejandro, Juan Jose.