

Práctica 6: Introducción a la Dinámica Molecular

1. El archivo 'ElectronEnCampoEyB.lammps' es un script de *lammps* para simular el movimiento de una partícula cargada en un campo eléctrico externo constante. Configurar los parámetros del mencionado script de manera que represente la simulación del movimiento de un electrón que a $t = 0$ parte de la posición $\vec{r}_0 = (0, 0, 100)$ con una velocidad $\vec{v}_0 = (10, 0, 0)$. Configurar el campo eléctrico de manera tal que este dirigido en el sentido positivo del eje Y, con una intensidad de 0,1. Todas las unidades se asumen medidas en el sistema de unidades correspondiente al estilo 'real' de *lammps*. Ejecutar *lammps* con este script de configuración, registrando la posición del electrón en función del tiempo. Visualizar la trayectoria generada mediante *gnuplot*. Resolver analíticamente las ecuaciones del movimiento y comparar con los resultados de la simulación.
2. Modificar el script del ejercicio anterior agregando un campo magnético constante dirigido en la dirección del eje Y. Resolver analíticamente las ecuaciones del movimiento para obtener los tipos de trayectoria esperados en cada caso (NO es necesario asignar valores numéricos a los campos). Modificar los valores de los campos eléctrico y magnético de manera tal de obtener un ejemplo de trayectoria parabólica, circular y helicoidal, guardando en tres archivos de imagen un ejemplo de cada tipo de trayectoria.
3. El archivo 'ArgonLJ.lammps' es un script de *lammps* para simular un sistema gaseoso a temperatura y volumen constante de un número fijo N de átomos de Argon interactuando mediante un potencial de a pares de tipo Lennard-Jones. Ejecutar *lammps* con este archivo de configuración, registrando la evolución de la presión del gas. Correr la simulación para distintas temperaturas, registrando la presión de equilibrio. ¿Qué observa? Similarmente, realizar diferentes corridas variando el volumen del sistema, para una temperatura fija. Generar isothermas registrando la dependencia entre presión y volumen. Comparar los resultados obtenidos con la ecuación de estado de los gases ideales.