

## Exercício 7: Dinâmica molecular

*Data da aula:* 10 de novembro (LF) e 22 de novembro (MIEF/MIEBB)

*Data limite para entrega do relatório:* 24 de novembro (LF) e 6 de novembro (MIEF/MIEBB)

### 7.1. Gás de Lennard-Jones

Escreva um código de dinâmica molecular, usando o algoritmo de Verlet, para N partículas em três dimensões. Tenha em atenção os seguintes pontos:

1. Considere que a interação entre partículas é uma interação de pares descrita pelo potencial de Lennard Jones:

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

2. Use um raio de corte de  $2.5\sigma$ ;
3. Use unidades de simulação (distâncias em unidades de  $\sigma$ , energia em unidades de  $\varepsilon$  e massa em unidades de  $m$ . Ou seja, na prática considera-se que  $\sigma$ ,  $\varepsilon$  e  $m$  são unitários;
4. Use passos de tempo pequenos;
5. Considere condições de fronteiras periódicas;
6. Como condições iniciais defina as posições de todas as partículas em dois instantes de tempo seguidos.

Calcule a energia potencial, a energia cinética e energia total em função do tempo. Mostre que a energia total se conserva.

**Nota 1:** para ser mais fácil testar o código, numa primeira fase, pode considerar partículas inicialmente posicionadas num plano com velocidades iniciais definidas no mesmo plano.

**Nota 2:** para visualizar simulações em 3D pode usar ferramentas de produção de gráficos (por exemplo, gnuplot) ou ferramentas de produção de vídeos (por exemplo, o *vmd* (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>) ou *paraview* (<http://www.paraview.org/>)).