

Prueba N°3 Física Computacional I - 1S 2023

Prof. Guillermo Fonseca Kuvacic

Julio 2023

Prueba con exigencia del 60%. Se necesitan 42 puntos para alcanzar una nota de 4.0.

Pregunta 1 - Distribuciones de velocidades (70 puntos)

Considere el potencial de Lennard-Jones 12-6

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

Inicialice un sistema de 800 partículas esféricas uniformes, que interactúan entre sí con el potencial de Lennard Jones. Considere una densidad de $\rho = 0,8$.

Inicialice las posiciones de partículas en un cubo como mejor estime conveniente. Sin embargo, inicialice las velocidades mediante una distribución normal, con media 0 y varianza 2 (temperatura 2 en unidades reducidas).

Evolucione el sistema durante 1000 pasos, utilizando un termostato con temperatura 1.

Grafique las distribuciones de velocidades del ultimo paso, en cada uno de los ejes, así como también la distribución de la magnitud de la velocidad. Se esperan 4 gráficos.

Considere unidades reducidas.

Comente sobre las distribuciones resultantes.