"Simulaciones Computacionales en Física" Curso 2023

PRÁCTICA 3 *Simulaciones de dinámica molecular. Sólidos, líquidos, transiciones de fase.*

En esta práctica se estudia un sistema de partículas clásicas que interactúan via un potencial de Lennard Jones **[1]**:

$$V(r) = 4\varepsilon\left(\left(\sigma/r\right)^{12} - \left(\sigma/r\right)^{6}\right)$$

Suponemos que elegimos las unidades tales que σ=1, ε=1, k:kte de Boltzman=1, m:masa de las part.=1.

<u>Notación:</u> ρ= densidad=N/V, U=Energía potencial por partícula, K=energía cinética por partícula, E=U+K, T=temperatura, P=presión, N= nro de partículas, V=Volumen

1) Partiendo de la siguiente condición inicial:

ρ=1.024, N=1372,

$\mathbf{r_i}$: correspondientes a una red perfecta con estructura FCC,

$\mathbf{v_i}$ tales que $|\mathbf{v_i}|=v_0\ \forall$ i y direcciones aleatorias, donde v_0 es tal que T=0.4,

realice una simulación a E=cte, V=cte y observe:

a) Cuánto tiempo le lleva al sistema alcanzar el equilibrio.
b) Los valores de E, U y K de equilibrio. Compárelos con los valores iniciales, explique.
c) Grafique la distribución de velocidades de las partículas para t=0.03, 0.06, ... y observe cuando converge a la distribución de Maxwell-Boltzmann.

2) Equilibre un sólido FCC con ρ=1.024 y N=1372 a V=cte y T=cte para las siguientes temperaturas: T=0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.8, 1.2.

a) Calcule U_0=U para T=0.
b) Obtenga los valores de equilibrio de U, K y E para cada T.
c) Grafique K(T), $\Delta U(T)=U(T)-U_0$ y ΔU en función de K. Concluya de estas gráficas, cuando comienzan a ser observables las anarmonicidades del potencial.

3) a) Parta de la condición inicial del ejercicio 1) y caliente el sistema entregándole energía a un ritmo constante dE/dt = 0.1 aproximadamente, hasta que su temperatura llegue a T=3. Grafique E(t), T(t) y T(E).

---

[1] En realidad (a efectos de acelerar el cálculo) se multiplica a V(r) por una función escalón, de manera que el potencial es nulo para $r>r_C$. Así, solo se tendrán en cuenta las interacciones de una partícula con las que estén dentro de una esfera de radio r_C. Usualmente se toma r_C del orden de 2.5σ.

Grafique $\sum_{i=1}^{N} \cos\left(\mathrm{k.r}_i(t)\right)$ con **k** los vectores de la red recíproca de una red FCC. Analice las gráficas y discuta en qué momento se produce la transición de fase.

b) Enfríe el sistema al mismo ritmo. Describa lo que sucede. NOTA: es posible que precise calcular otras magnitudes o realizar simulaciones adicionales para analizar el comportamiento observado.

<u>Ejercicios adicionales (opcionales):</u>

4) Partiendo de la siguiente condición inicial:
ρ=1.024, N=1000,
$\mathbf{r_i}$: correspondientes a una red perfecta con estructura cúbica simple (SC),
$\mathbf{v_i}$ tales que $|\mathbf{v_i}|=v_0$ $\forall$ i y direcciones aleatorias, donde v_0 es tal que T=0.05
Realice una simulación a E=cte, V=cte por un tiempo t=3. Describa lo que sucede.

5) Equilibre un sólido FCC con ρ=1.024 y N=1372 a V=cte y T=0.8.
a) Calcule la función de correlación de pares g(r).
b) Continúe la simulación en el microcanónico y calcule $r^2(t)$, Z(t)=<v(t).v(0)> y su transformada de Fourier Z(ω).

6) Obtenga configuraciones de líquido equilibrado a T=1.2 y V=cte (ρ=1.024 y N=1372) y calcule g(r), $r^2(t)$, Z(t) y Z(ω). Calcule el coeficiente de difusividad: D. Para equilibrar el líquido tome cualquier configuración de los items anteriores y caliéntela hasta T=4, por ejemplo, y enfríe luego hasta T=1.2.