"Simulaciones Computacionales en Física" Curso 2023

PRACTICA 1:

1) Realice estimaciones numéricas de la integral:

$$\int_0^{\pi} sen(x)dx$$

   a) Utilizando la regla de los trapecios partiendo el intervalo de integración en nx intervalos iguales. Considere nx=100, 1000, 10000, 100000.
   b) Idem, pero evaluando la función en el punto medio del intervalo.

   Verifique que a) y b) funcionan como cotas inferior y superior de la integral respectivamente en este caso.

2) a) Halle el valor de r y *V(r)* correspondientes al mínimo del potencial de Lennard-Jones:

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

   b) Haga un programa y verifique numéricamente que hizo bien la cuenta.

   c) Grafique *V(r)* para σ=1, ε=1.

3) Considere un sólido compuesto por un único tipo de átomos donde la interacción entre los mismos está bien aproximada por un potencial de Lennard-Jones. Tome σ=1, ε=1.
   a) Calcule la Energía potencial del sólido para las estructuras cúbica simple (SC), cúbica centrada en el cuerpo (BCC) y cúbica centrada en las caras (FCC) en función del parámetro de red.
   b) ¿Cuál es la estructura más estable a bajas temperaturas? Obtenga el parámetro de red de equilibrio y la Energía de Cohesión.

4) Considere la dinámica de una partícula en una dimensión bajo la acción de un potencial de Lennard-Jones *V(x)* con σ=1, ε=1, m: masa de la partícula=1.
   a) Haga un programa que resuelva numéricamente la dinámica de la partícula y grafique x(t) para $0 < t < 5$. Use un paso dt=0.0001 para integrar las ecuaciones. Considere la condición inicial: x(0)=1.125, $v_x(0)=0$.
   b) Idem para la condición inicial: x(0)=1.25, $v_x(0)=0$.
   c) Idem: x(0)=1.25, $v_x(0)= -1$.
   d) Halle, para x(0)=1.25, a partir de qué velocidad inicial la partícula ya no estará ligada.
   e) Repita el ítem c) usando dt=0.001. ¿Qué concluye?