



Guía CFIS161

Sesión 6

Actividades

1. Funciones y Listas

Cree un fichero llamado `lista.py`, el cual cree una lista de 10 números ordenados del 1 al 10. Luego el programa deberá informar:

- ¿Cuál es el número mayor?
- ¿Cuál es el número menor?
- ¿Cuál es el promedio geométrico?
- Si éstos fueran grados Celsius, ¿cuál sería su equivalente en Fahrenheit y Kelvin?. Entregue su respuesta de tal forma que el usuario entienda las equivalencias.
- Opere las funciones: `exp`, `sin`, `tan` y `cos`, sobre la lista y presente los resultados en pantalla para cada valor de la lista.

2. Arreglos y Lectura de Archivos

Usando `vim`, escriba un programa (llamado `distancias.py`) en Python que permita leer desde un archivo una matriz de posiciones (x, y, z) en el espacio tridimensional y calcule las distancias entre ellas, para imprimirlas en pantalla. El programa debe **leer** la matriz y asignarla en un *array*, de dimensiones $n \times 3$, donde cada fila corresponde a un punto con sus correspondientes valores x, y, z en cada columna. El programa debe calcular la energía potencial de Lennard-Jones del sistema, esto es, para cada átomo ud. debe calcular la contribución en energía con cada átomo del sistema, sin repetir la interacción. A continuación se indican los puntos que debe ingresar en el fichero `posiciones.dat` y el potencial de Lennard-Jones:

3.403	4.687	9.815
3.109	5.272	9.097
3.817	3.973	9.327
2.710	6.185	7.540
2.467	6.236	6.561
3.410	6.855	7.580

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

Donde r es la distancia entre los átomos, σ y ϵ son constantes que dependen del material a evaluar. En este caso considere ambas 1.