

Física Computacional 2022 - Laboratorio N°5

Dinámica Molecular

Entregar hasta 15/06/22

No olvidar para toda simulación!: (a) Siempre adimensionalizar las ecuaciones convenientemente, como primer paso. (b) Tomar los promedios luego de descartar un transitorio, luego de la termalización/equilibración. (c) Calcular siempre fluctuaciones y errores de las cantidades medidas.

entregar

1. Escribir un programa de Dinámica Molecular (MD) para un sistema de Lennard-Jones en el ensamble microcanónico, con el método de Verlet-velocidad y condiciones periódicas de contorno. Considerar $N = 256$ átomos, densidad $\rho = \frac{N}{V} = 0.8$, y temperatura “de referencia” $T_0 = 1.1$. Tomar como condición inicial una red FCC y una distribución de velocidades al azar. Tomar paso de tiempo $\Delta t = 0.005$ y radio de corte $r_{cut} = 2.5$.
 - (a) Calcular en función del tiempo E_{kin} , E_{pot} , E_{tot} , “presión” $p(t)$ y “temperatura” $T(t)$ instantáneas. Tomar $t_{eq} = 1000$ pasos de termalización reescalando las velocidades cada $t_{scal} = 50$ pasos, y luego otros $t_{run} = 1000$ pasos sin modificar las velocidades.
 - (b) Luego de la termalización ($t > t_{eq}$), calcular durante los t_{run} pasos siguientes: $\langle E_{kin} \rangle$, $\langle E_{pot} \rangle$, presión p , temperatura media T , y las fluctuaciones $\delta E_{kin} = \sqrt{\langle (E_{kin} - \langle E_{kin} \rangle)^2 \rangle}$, δE_{pot} , δE_{tot} , δp , δT . ¿Por qué fluctuó la energía total?
 - (c) Luego de termalizar, obtener un histograma de velocidades en cada dirección y comparar con la distribución de Maxwell de velocidades.
 - (d) Tomar ahora una condición inicial de distribución de velocidades de Maxwell, usar subrutina del N.R. “gasdev”. Comparar luego de la termalización las distribuciones de velocidades. Además de comparar la forma final de las distribuciones, comparar tiempos para llegar a ellas. ¿Qué concluye?
 - Estudiar dependencia de errores y tiempo de CPU (es importante que logren este punto!):
 - (e) Calcular $\Delta E_{tot}/\Delta E_{kin}$ en función del paso de integración Δt (e.g. $\Delta t = 0.02, 0.01, 0.005, 0.002, 0.001, \dots$). Para poder comparar los resultados y que tenga sentido la comparación, no olvidar mantener fijo el tiempo físico!, por ejemplo $\tau_{run} \cdot \Delta t = 2$.
 - (f) Calcular $\Delta E_{tot}/\Delta E_{kin}$ y $\Delta E_{tot}/\Delta E_{pot}$ en función de r_{cut} , variando r_{cut} de 1.0 a 5.0 (elegir Δt suficientemente pequeño tal que $\Delta E_{tot}/\Delta E_{kin}$ no esté determinado por Δt sino por r_{cut}).

- (g) Tomar $\tau_{run} = 10$ y obtener el tiempo de CPU en función de N para $N = 4 \times N_c^3$, $N_c = 3, 4, 5, 6, 7, 8$.
- (h) Lo mismo que en (g) pero usando el método de búsqueda de vecinos “linked-list” (usar rutina del Allen and Tildesley y traten de lograrlo, es muy importante para MD! si tienen dificultades, en informe las describen. Posgrado crucial hacerlo).

entregar

2. Preparar un programa de MD en el ensamble canónico (reescalando velocidades) con $N = 500$ partículas. Para $(T_0 = 1.0, \rho = 0.8)$ y $(T_0 = 1.0, \rho = 1.2)$, obtener:

- (a) Función de distribución radial $g(r)$. Comparar la $g(r)$ con la obtenida con MC en guía anterior.
- (b) Parámetro de orden cristalino en función del tiempo (a partir de una condición inicial FCC):

$$S(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{N^2} \left| \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i(t)} \right|^2,$$

$$\mathbf{k} = (2\pi/a)[-1, 1, -1], \quad a = L/(N/4)^{1/3}.$$

- (c) Obtener el coeficiente de difusión D graficando en función del tiempo

$$\langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)|^2 \rangle \approx 6Dt.$$

y realizando un fiteo lineal para t grandes.

Identificar a qué fase (sólido o líquido) corresponde cada caso.

entregar

3. Estudiar la transición sólido-líquido en el sistema de Lennard-Jones. Trabajar en el ensamble canónico reescalando velocidades en cada paso de tiempo. Elegir los parámetros de la simulación ($N, \Delta t, r_{cut}, t_{eq}, t_{run}$) que crea más convenientes. Obtener variando la densidad desde $\rho = 1.2$ hasta $\rho = 0$:

posgrado

- (a) Presión p vs. ρ .
- (b) Parámetro de orden cristalino $\langle S(\mathbf{k}) \rangle$ vs. ρ .
- (c) Constante de difusión D vs. ρ .

Consultar los resultados de Hansen y Verlet [[Physical Review](#) **184**, 151 (1969)], paper clásico, citado 1629 veces en 2021] para la transición sólido-líquido.