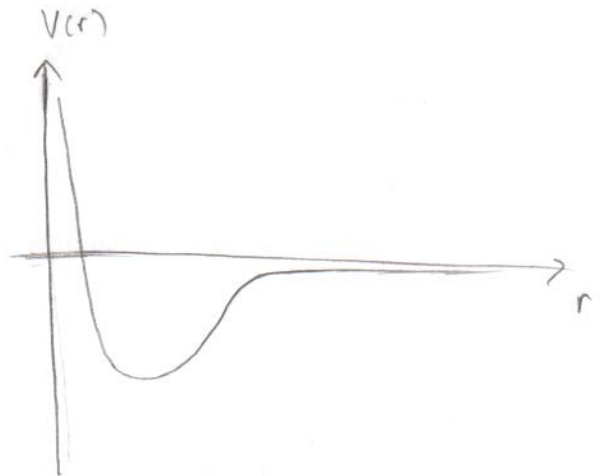


Cálculo das Forças

↳ Potencial de Lennard-Jones

$$V(r) = q' \left\{ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\}$$



$$F = - \frac{\partial V}{\partial r} = q' \left( 12 \frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - 6 \frac{\sigma^6}{r^7} \right)$$

$F=0 \rightarrow$  Extremos do potencial

$$12 \frac{\sigma^{12}}{r_*^{13}} - 6 \frac{\sigma^6}{r_*^7} = 0 \rightarrow$$

$$r_* = 2^{\frac{1}{6}} \sigma$$

Fazendo  $\sigma = 2^{-\frac{1}{6}}$ , temos  $r_* = 1$

É o potencial:

$$V(r) = q' \left\{ \left( \frac{2^{-\frac{1}{6}}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{2^{-\frac{1}{6}}}{r} \right)^6 \right\} \rightarrow$$

$$V(r) = q' \left\{ \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6} \right\}$$

É a força:

$$q = \frac{q'}{4}$$

$$|\vec{F}| = 12q \left( \frac{1}{r^{13}} - \frac{1}{r^7} \right)$$

$$\vec{F}(r) = 12q \left( \frac{1}{r^{14}} - \frac{1}{r^8} \right) \vec{r}$$



$$\vec{F}(r) = 12q \left( \frac{1}{(r_{12}^2)^7} - \frac{1}{(r_{12}^2)^4} \right) \vec{r}$$

→ Termostato de Berendsen

$$\frac{dT}{dt} = \frac{T_0 - T}{\tau} \quad \xrightarrow{\quad \uparrow \quad} \quad T_{i+1} = T_i + \frac{T_0 - T_i}{\tau} dt$$

Aproximando  
por Euler

$$T_i = \frac{1}{N} \sum_j \frac{1}{2} m v_j^2$$

$$\sqrt{\frac{T_{i+1}}{T_i}} = \sqrt{1 + \left( \frac{T_0 - T_i}{T_i \tau} \right) dt}$$

Calcular Calor específico

$$C = \frac{\Delta E_T}{\Delta T}$$

$$T = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle$$

$$V_{i+1} = \sqrt{\mu} V_i$$

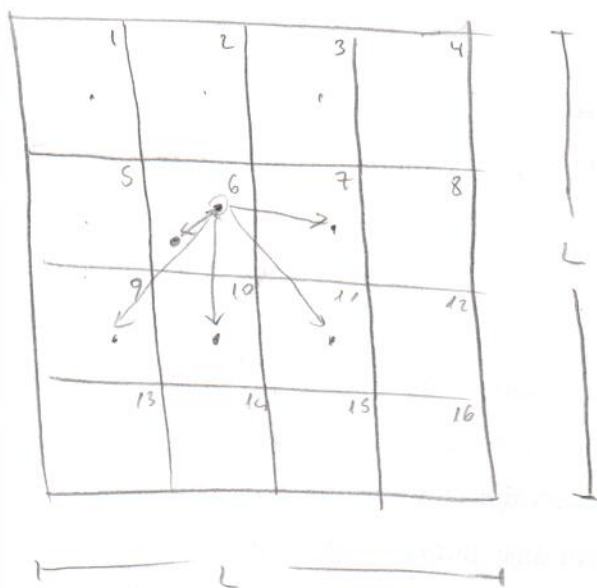
$$V_{i+1} = T_f (V_x^2 + V_y^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$V_{i+1} = (T_d^2 V_x^2 + T_f^2 V_y^2)^{\frac{1}{2}}$$

# Método das caixas

04/06/2019

(para interações de curto alcance)



calcula a força entre somente metade das caixas ao redor e a caixa do centro.

OBS: Com uma correção para que as partículas nunca ultrapassem os bordos do array (L).

## 1) Classe partícula():

Atributos:  $\vec{r}$ ,  $\vec{v}$ , idut, Force, Ec, Mybox

Métodos: mybox(), my-Ec(), evol0(dt), evol1(dt), reflex(L)  
force(dr), forces-between-particles(), zero-force()  
change-box()

## 2) Classe caixas:

Atributos: index, mylist, neighboxlist

Métodos: neighboxlist()

## Programa principal:

0) Init  $\rightarrow L, lbox, N$

1) Define objetos p/ partículas e caixas.

2) Construir box.mylist

3) Construir box.neighboxlist()

## Loops temporal

- 4) Calcular as forças entre as partículas;
- 5) Evolução primeiro passo Velocity-Verlet (evol  $\phi$ )
- 6) Zero-forças(1)
- 7) Evolução segundo passo Velocity-Verlet (evol  $\pm$ ),
- 8) Reflete nas paredes;
- 9) Traça as partículas de caixa se necessário;
- 10) Refaz lista de vizinhos
- 11) Zera as forças.

forces  
neighbor-list