



Next: [About this document ...](#)

Métodos Computacionais da Física C IF-UFRGS

Iª Parte - Dinâmica Molecular

1 - Faça um algoritmo para simular a dinâmica de N partículas não interagentes confinadas em uma região bidimensional de dimensões L_x, L_y . Considere paredes reflexivas.

2 - Dado o potencial de Lennard-Jones

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

- Mostre que ele tem um mínimo em $r_{min} = 2^{\frac{1}{6}}\sigma$.
- Tomando-se $r_{min} = 1$ e $q = q'/4$, mostre que a força entre pares de partículas é dada por

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

3 - Considerando a abordagem onde todas as partículas interagem, escreva um algoritmo para calcular a força que age sobre cada partícula.

4 - Quando se pode usar o método das caixas? Como se faz o cálculo das forças nesse caso?

5 - Escreva um algoritmo para simular a dinâmica de N partículas confinadas em uma região bidimensional de dimensões L_x, L_y , interagindo pelo potencial de Lennard-Jones. Considere paredes reflexivas. Use o método das caixas e integre as equações diferenciais usando o método velocity-Verlet.

6 - O que é um termostato? Qual a idéia e como se implementa o termostato de Berendsen?

IIª Parte - Dinâmica Estocástica

Exercícios do Livro Métodos Computacionais da Física - Prof. Cláudio Scherer - 2ª Edição

- Exemplo: 7.1, 7.2, 7.3, 7.4
- Exercícios: 7.1, 7.2, 7.3, 7.4, 7.5, 7.6

• [About this document ...](#)



Next: [About this document ...](#)

Leonardo Gregory Brunnet 2019-06-17