

Simulação Computacional dos Materiais

Caetano Rodrigues Miranda

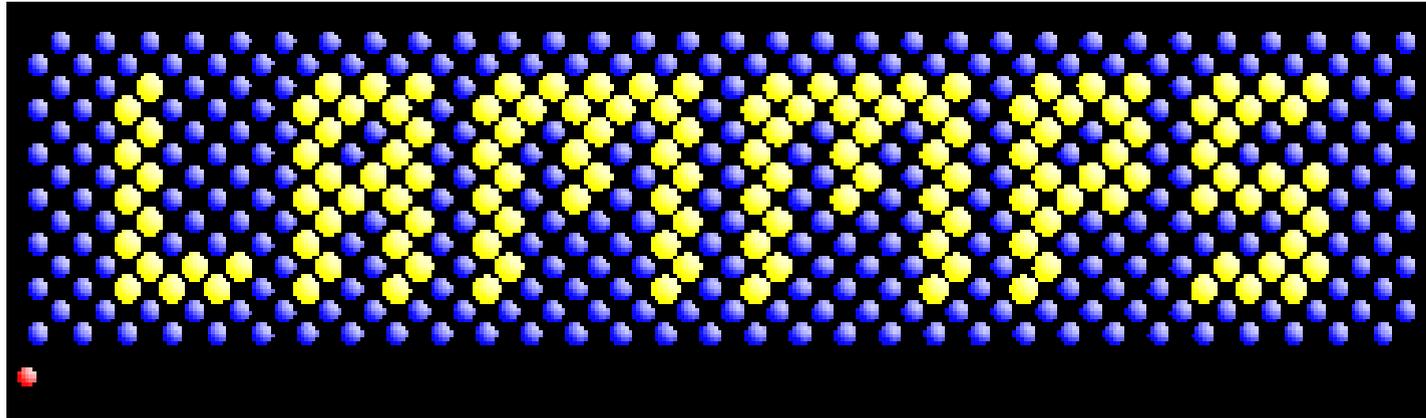
IFUSP

crmiranda@usp.br

AULA 12 – 25/09/2020

Parte A





Lammps web-page:

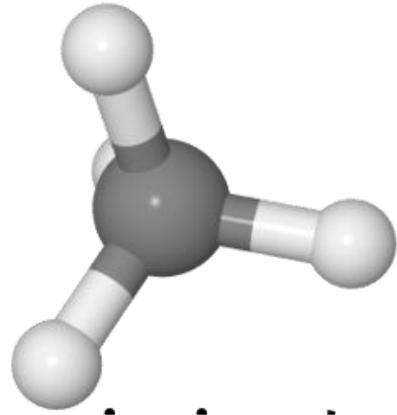
<http://lammps.sandia.gov/>

LABORATÓRIO DINÂMICA MOLECULAR II



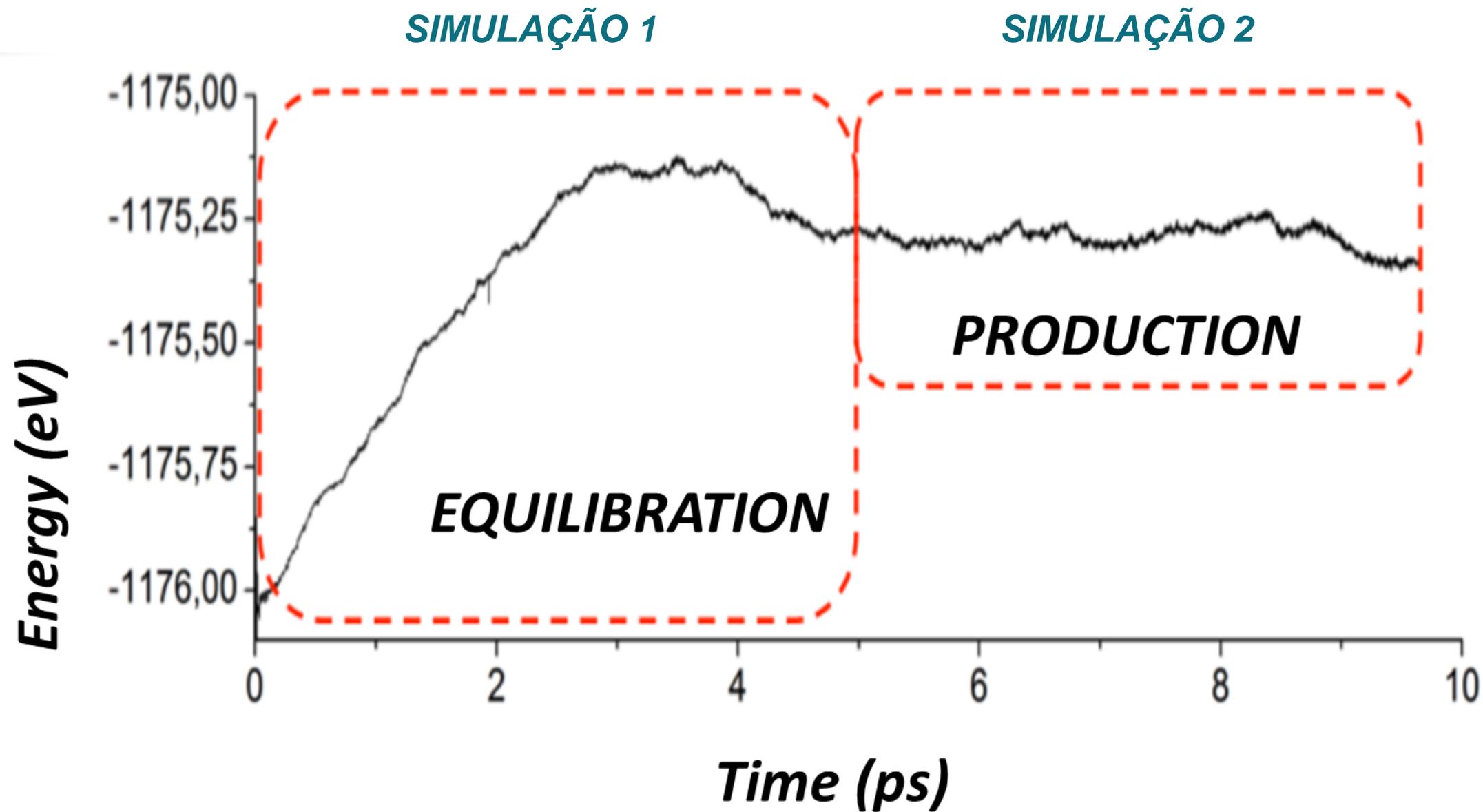
Missão 2 : calcular as propriedades dinâmicas e estruturais do metano

Todos irão contribuir com a análise para uma dada **Temperatura** e **Pressão**.

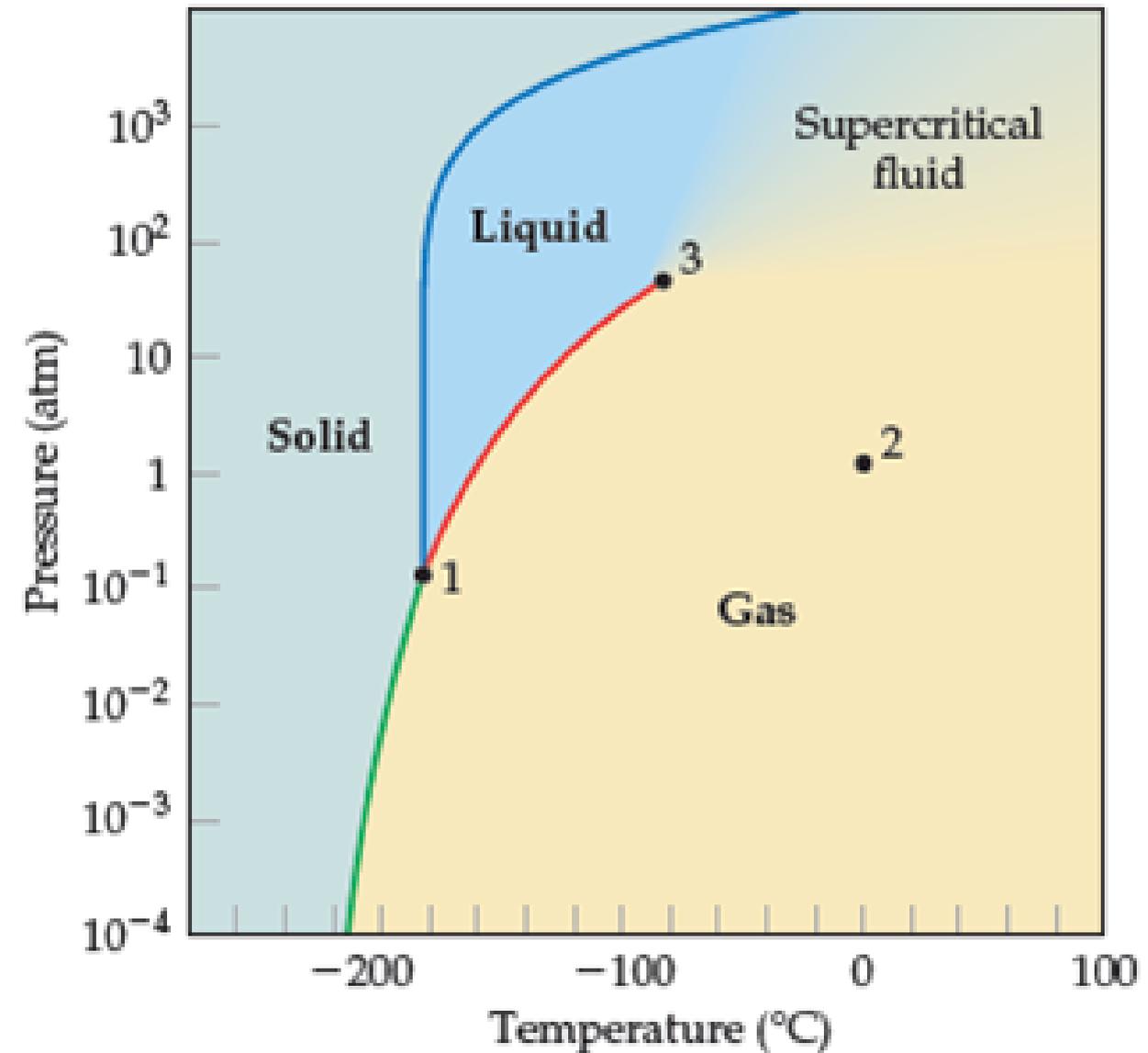
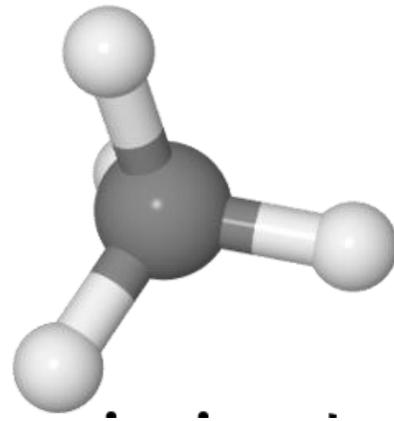


Discente	Temperatura (K)	Densidade (kg/m ³)
1
2
3

Propriedades de equilíbrio



Como caracterizar um LÍQUIDO?



Propriedades de transporte

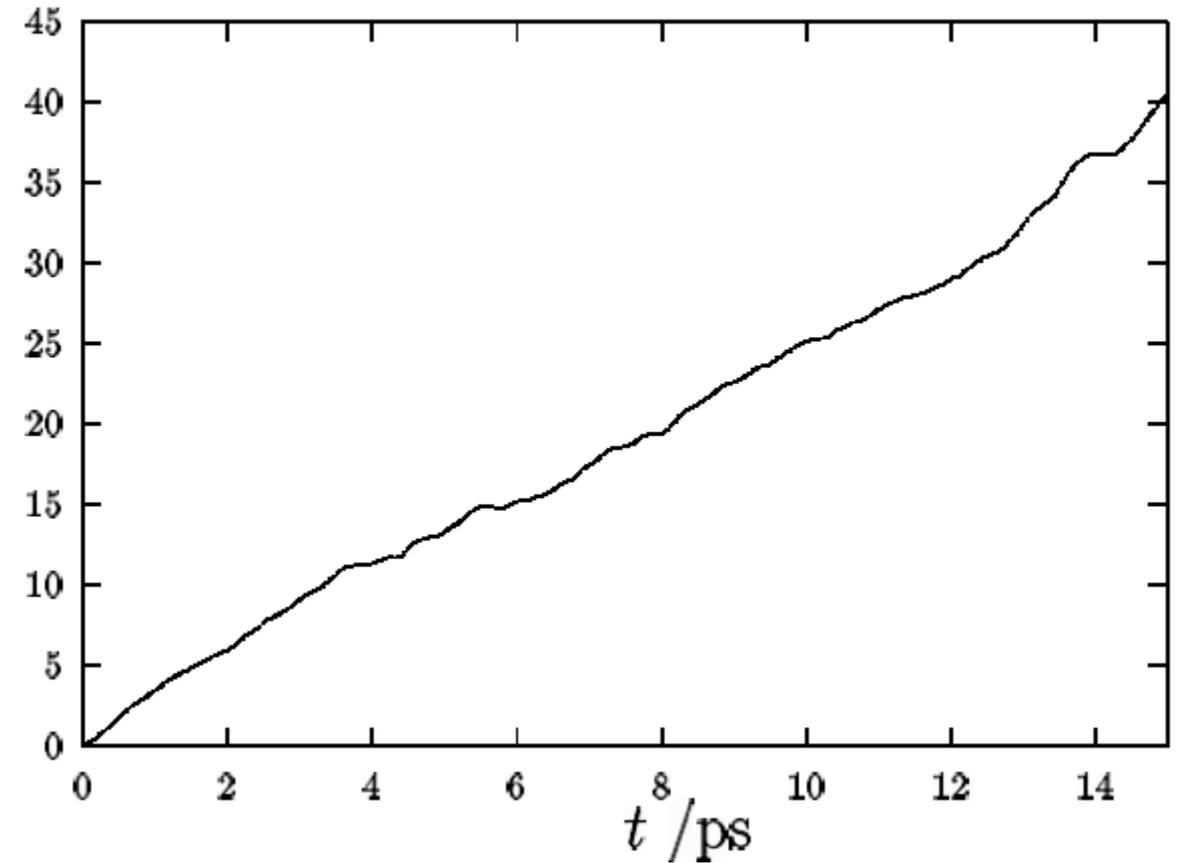
Relação de Einstein (t longo)

$$\langle \Delta r(t)^2 \rangle = 6Dt$$

Deslocamento Quadrático médio

$$\langle \Delta r(t)^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0))^2$$

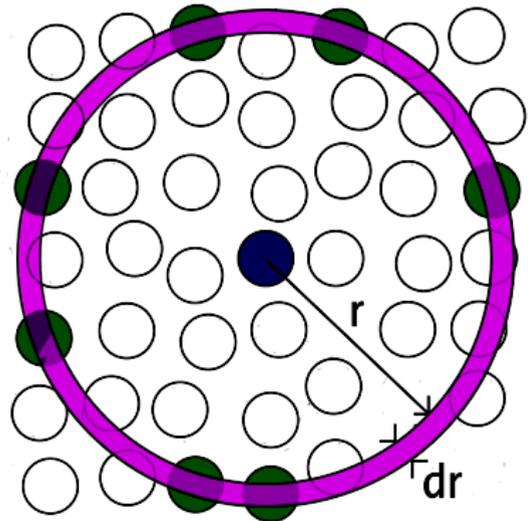
$\langle \Delta r(t)^2 \rangle$



Viscosidade

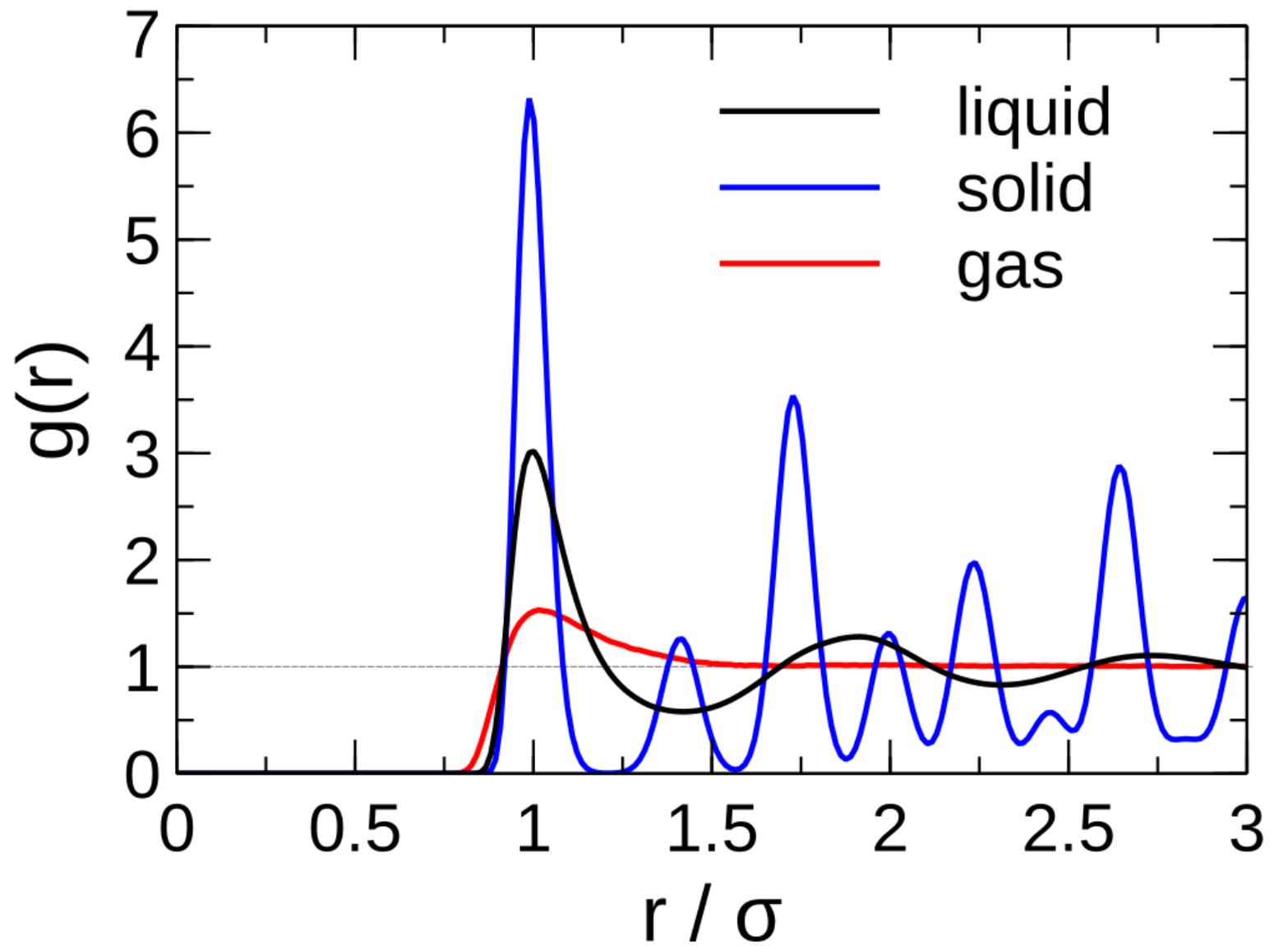
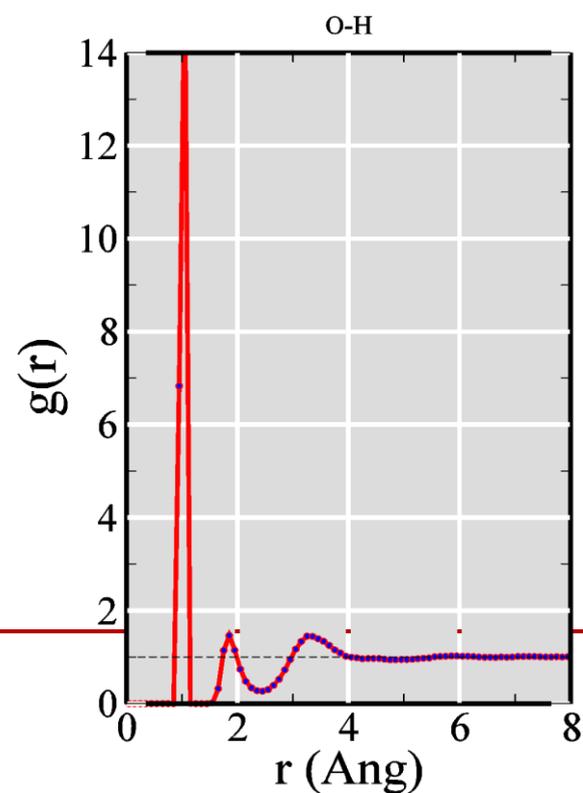
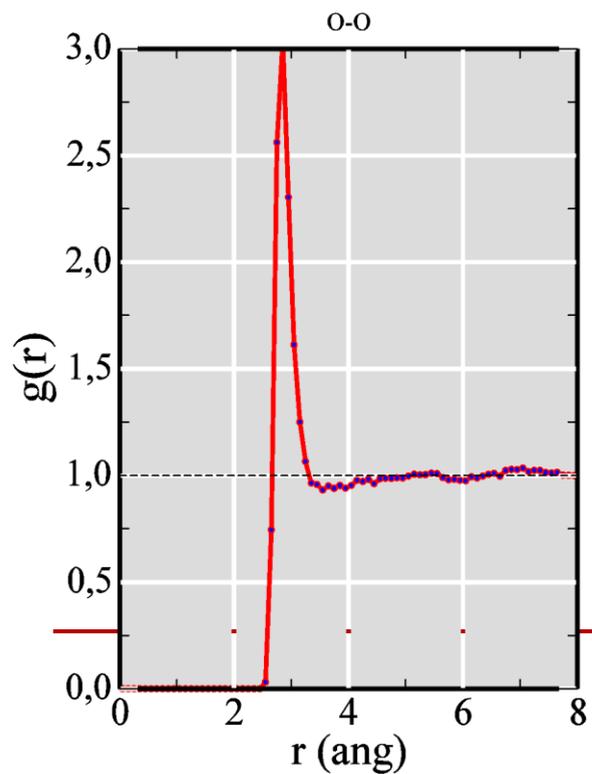
$$\eta = \frac{V}{3k_B T} \int_0^\infty \left\langle \sum_{x < y} P_{xy}(t) P_{xy}(0) \right\rangle dt$$

Função de distribuição radial $g(r)$



Agua bulk (nvt)

Agua bulk (nvt)



Relatório (Entrega - 10/10/2020) – Formato livre

- Nome / #USP
- **Motivação:** Informação quanto as condições simuladas
- **Metodologia:** Método / Potencial / Protocolo /
- **Resultados:** Gráficos (Equilibração e Produção)
- Instantâneo da configuração final
- Gráficos quanto as propriedades físicas de interesse
- Valores da Pressão, Viscosidade, Coeficiente de Difusão e curva da distribuição radial de pares
- Qual fase está seu Sistema ? Comparação com o experimental.