

## Guía para la elaboración del informe del Trabajo Práctico de Dinámica Molecular

Deberán elaborar un informe por grupo de trabajo frente a las computadoras, sobre el Trabajo Práctico realizado detallando lo siguiente:

- Nombres de todos los integrantes del equipo.
- Cuál es a su entender el objetivo del TP.
- Breve introducción en la que describan conceptualmente, con sus palabras, el desarrollo del Trabajo Práctico y, someramente, la técnica de simulación utilizada.
- Descripción del comportamiento del sistema modelo a partir del análisis de las gráficas obtenidas (Poner todas las gráficas: Energía Cinética, Energía Potencial, Temperatura, Densidad y Función de Distribución Radial  $g(r)$  para cada temperatura estudiada). Introducir las unidades correctamente.  
Analizar:
  - Estabilidad de las variables ¿A qué tiempo se produce y cómo puedo asegurarlo?
  - Comportamiento remarcable de algunas de las gráficas (diferencias en las formas de alcanzar la estabilización en las energías, estabilidad de la densidad, de qué manera identifico el cambio de fase, diferencias entre los sistemas a 273K, comportamiento de las  $g(r)$ ).
- Conclusiones sobre el comportamiento del sistema y la herramienta computacional.
- Virtudes y defectos que observen del Instructivo.