

Projeto 1

Monte Carlo do tipo annealing para encontrar o estado fundamental, o primeiro e o segundo estados excitados do potencial de Lennard e Jones:

$$V_{LJ}(x) = \varepsilon + 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{x} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{x} \right)^6 \right],$$

com

$$\sigma = \frac{x_{min}}{2^{1/6}}$$

e

$$\varepsilon = \frac{x_{min}^2}{72},$$

exatamente como em nossas aulas correspondentes.