

**Simulació per Dinàmica de Langevin Generalitzada**  
**de Sistemes de Partícules Interactives**

**Gemma Sesé i Castel**

Departament de Física Fonamental  
Facultat de Física Universitat de  
Barcelona

**SIMULACIÓ PER DINÀMICA DE LANGEVIN GENERALITZADA**  
**DE SISTEMES DE PARTÍCULES INTERACTIVES**

Memòria de la tesi realitzada per  
Gemma Sesé i Castel, sota la direcció del  
Dr. Joan A. Padró i Cárdenas, per a optar  
al grau de Doctora en Ciències Físiques.

Barcelona, Abril del 1990.

## REFERENCES

- ADELMAN S.A., 1976, *J. Chem. Phys.* 64, 724.
- AKESSON T. and JONSSON B., 1985, *Molec. Phys.* 54, 369.
- ALLEN M.P., 1980, *Molec. Phys.* 40, 1073.
- ALLEN M.P., 1982, *Molec. Phys.* 47, 599.
- ALLEN M.P. and TILDESLEY D.J., 1987a), *Computer simulation of liquids*. Clarendon Press-Oxford. Capítol 3.
- ALLEN M.P. and TILDESLEY D.J., 1987b), *Computer simulation of liquids*. Clarendon Press-Oxford. Capítol 9.
- BACON J., DICKINSON E. and PARKER R., 1983, *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 76, 165.
- BALCELLS M., 1984. *Tesina de Llicenciatura*. Universitat de Barcelona.
- BALUCANI U., TOGNETTI V., VALLAURI R., GRIGOLINI P. and LOMBARDO M.P., 1981, *Phys. Lett.* 86, 426.
- BALUCANI U., TOGNETTI V., VALLAURI R., GRIGOLINI P. and MARÍN P<sub>M</sub> 1982, *Z. Phys. B*, 49, 181.
- BATCHELOR G.K., 1976, *J. Fluid Mech.* 74, 1.
- BEEMAN D., 1976, *J. Comput. Phys.* 20 130.
- BERKOWÍTZ M., MORGAN J.D. and MC CAMMON J.A., 1983, *J. Chem. Phys.* 78, 3256.
- BERKOWITZ M. and WAN W., 1987, *J. Chem. Phys.* 86, 376.
- BERNE B.J., 1977, *Modern theoretical chemistry*, Vol. 6 {*Statistical Mechanics Part B: Time Dependent Processes*}. Plenum Press. New York (Cap.5).
- BERNE B.J. and HARP G.D., 1970, *Adv. Chem. Phys.* 17, 63.
- BERNE B.J. and PÉCORA R., 1976, *Dynamic light scattering*. John Willey & sons, inc. Capítol 11.
- BERTHELOT D., 1898, *C. r. hebd. Séanc. Acad. ScL, Paris* 126, 1073, 1857.
- BOON J.P. and YIP S., 1980, *Molecular Hydrodynamics*. Me Graw Hill International Book Company. Capítols 2 i 3.
- BOSSIS G., QUENTREC B. and BOON J.P., 1982, *Molec. Phys.* 45, 191.
- CANALES M. and PADRO J.A., 1988, *Molec. Sim.* 1, 403.
- CICCOTTI G., FERRARIO M. and RYCKAERT J.P., 1982, *Molec. Phys.* 46, 875.
- CICCOTTI G., FRENKEL D. and MC DONALD I.R., 1987. *Simulation of liquids and solids*. North-Holland Physics Publishing. Elsevier Science Publishers B.V.
- CICCOTTI G. and RYCKAERT J.P., 1980, *Molec. Phys.* 40, 141.
- CICCOTTI G. and RYCKAERT J.P., 1981, *J. Stat. Phys.* 26, 73.

CHANDRASEKHAR S., 1943, *Rev. Mod. Phys.* 15, 1.

DEUTCH J.M. and OPPENHEIM I., 1971, *J. Chem. Phys.* 54, 3547.

DÍAZ F.G. and GARCÍA DE LA TORRE J., 1988, *J. Chem. Phys.* 88, 7698.

DICKINSON E., 1985, *Chem.Soc.Rev.* 14, 421. Royal Society of Chemistry. London.

DOLL J.D. and DION J.R., 1976, *J. Chem. Phys.* 65, 3762.

DOOB J.L., 1944, *Ann. Math. Statist.* 15, 229.

ERMAK D.L. and BUCKHOLZ H., 1980, *J. Comput. Phys.* 35, 169.

ERMAK D.L. and MC CAMMON J.A., 1978, *J. Chem. Phys.* 69, 1352.

EVANS G.T. and KNAUSS D.C., 1980, *J. Chem. Phys.* 72, 1504.

FRIEDMAN H.L., 1985a), *A Course in Statistical Mechantes*. Prentice Hall, Englewood Cliffs. Capítol 7.

FRIEDMAN H.L., 1985b), *A Course in Statistical Mechanics*. Prentice Hall, Englewood Cliffs. Capítol 10.

GIRO A., GUARDIA E. and PADRO J.A., 1985, *Afolee. Phys.* 55, 1063.

GUARDIA E., 1986, *Simulado de líquids Lennard-Jones mitjangent la Dinàmica de Langevin*. Tesi doctoral. Universitat de Barcelona.

GUARDIA E., GIRO A. and PADRO J.A., 1986, *J. Chem. Phys.* 84, 4569.

GUARDIA E., GOMEZ-ESTEVEZ J.L. and PADRO J.A., 1987, *J. Chem. Phys.* 86, 6438.

GUARDIA E. and PADRO J.A., 1985, *J. Chem. Phys.* 83, 1917.

HANSEN J.P. and Me DONALD I., 1986 a), *Theory of simple liquids*. Academic Press. Capítol 5.

HANSEN J.P. and Me DONALD L., 1986 b), *Theory of simple liquids*. Academic Press. Capítol 7.

IMPEY R.W., MADDEN P.A. and MC DONALD I.R., 1982, *Molec. Phys.* 46, 513.

KUBO R., 1966, *Rep. Prog. Phys.* 23, 255.

LAAKSONEN A., NILSSON L.G., JONSSON B. and TELEMAN O., 1989, *J. Chem. Phys.* 129, 175.

LANTELME F. and TURQ P., 1982, *J. Chem. Phys.* 77, 3177.

LORENTZ H.A., 1881, *Annln. Phys.* 12, 127.

MC QUARRIE D.A., 1976. *Statistical Mechanics*. Harper & Row. Capítol 13.

MORÍ H., 1965, *Prog. Theor. Phys.* 33, 423.

MORÍ H., 1965, *Prog. Theor. Phys.* 34, 399.

NILSSON L.G. and PADRO J.A., 1990 (*resultáis pendants de publicado*).

PADRO J.A. and CANALES M., 1989, *Molec. Phys.* 68, 423.

PADRO J.A., CANALES M., SESE G. and GIRO A., 1988, *Physica* 148A, 253.

PADRO J.A., GUARDIA E. and GIRO A., 1986a), *Molec. Phys.* 57, 687.

- PADRO J.A., GUARDIA E. and SESE G., 1986b), *Phys. Lett. A* 115, 132.
- PADRO J.A., GUARDIA E. and SESE G., 1988, *Afolee. Phys.* 63, 355.
- PADRO J.A., TRULLAS J. and GIRO A., 1990, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.ien premsa)*
- PAPOULIS A., 1965. *Probability, random variables and stochastic processes*. Me Graw Hill.
- PATHRIA R.K., 1972, *Statistical Mechantes*. Pergamon Press. Capítol 13.
- POSCH H.A., BALUCANI U. and VALLAURI R., 1984, *Physica* 123 A, 516.
- POWLES J.G. and FOWLER R.F., 1987, *Molec. Phys.* 62, 1079.
- RANIERI F.O. and FRIEDMAN H.L., 1989a), *J. Chem. Phys.* 91, 5633.
- RANIERI F.O. and FRIEDMAN H.L., 1989b), *J. Chem. Phys.* 91, 5642.
- SESE G., 1985. *Simulado de sistemes líquids: propietats estructuráis i dínámiques en barreges d'isòtops*. Tesina de llicenciatura. Universitat de Barcelona.
- SESE G., GUARDIA E. and PADRO J.A., 1990, *J. Stat. PhysAen premsa)*.
- TOXVAERD S., 1984, *J. Chem. Phys.* 81, 5131.
- TOXVAERD S., 1985, *J. Chem. Phys.* 82, 5658.
- TOXVAERD S., 1987, *J. Chem. Phys.* 86, 3667.
- TRULLAS J., 1986. *Dinámica Molecular de sistemes amb interacció Coulombiana*. Tesina de llicenciatura. Universitat de Barcelona.
- TRULLAS J., GIRO A. and PADRO J.A., 1989, *J. Chem. Phys.* 91, 539.
- TYRRELL H.J.V. and HARRIS K.R., 1984. *Diffussion in liquids*. Butterwords. London.
- TURQ P., LANTELME F. and FRIEDMAN H.L., 1977, *J. Chem. Phys.* 66, 3039.
- TURQ P., LANTELME F. and LEVESQUE D., 1979, *Molec. Phys.* 37, 223.
- VAN GUNSTEREN W. and BERENDSEN H.J.C., 1981, *Molec. Phys.* 44, 69.
- VAN GUNSTEREN W. and BERENDSEN H.J.C., 1982, *Molec. Phys.* 45, 637.
- VAN GUNSTEREN W. and BERENDSEN H.J.C., 1982, *Molec. Phys.* 47, 721.
- VAN GUNSTEREN W. and BERENDSEN H.J.C., 1988, *Molec. Sim.* 1, 173.
- VAN GUNSTEREN W., BERENDSEN H.J.C. and RULLMANN J.A.C., 1981, *Molec. Phys.* 44, 69.
- VERLET L., 1967, *Phys. Rev.* 159, 98.
- VESELY F.J., 1984, *Molec. Phys.* 53, 505.
- VESELY F.J. and POSCH H.A., 1988, *Molec. Phys.* 64, 97.
- VOGELSANG R. and HOHEISEL C, 1987, *J. Stat. Phys.* 54, 315.
- VOGELSANG R. and HOHEISEL C, 1989, *J. Stat. Phys.* 47, 193.

WADSWORTH G.P. and BRYAN J.G., 1979, *Aplicaciones a la teoría de probabilidad y variables aleatorias*. Ed. Alhambra, Madrid. Capítols 4 i 8.  
WILSON M.A., POHORILLE A. and PRATT L.R., 1985, *J. Chem. Phys.* 83, 5832.  
ZWANZIG R., 1965, *Ann. Phys. Chem.* 16, 67.