

S F I D A D I F F I C I L E

SPERIMENTAZIONE E ANALISI DEI DATI

Gianluca Serra

12.04.23

Titolo: *Disposizione di atomi di litio su un'isosuperficie di densità elettronica.*

Introduzione. Consideriamo una molecola con N elettroni nello spazio cartesiano descritto dalle coordinate x , y e z . La *densità elettronica* $\rho(x, y, z)$ di questa molecola soddisfa per definizione la seguente relazione:

$$\int_{\Omega} \rho(x, y, z) d\tau = N,$$

dove il simbolo Ω indica che l'integrale è calcolato su tutto lo spazio e $d\tau$ è un elemento infinitesimo di spazio. La densità elettronica in un certo punto dello spazio indica quanti elettroni sono presenti intorno a quel punto dello spazio. In altri termini, $\rho(x, y, z)$ è un numero di elettroni per unità di volume, e quindi $[\rho] = L^{-3}$, cioè le dimensioni della densità elettronica sono il reciproco di un volume. Possiamo esprimere $\rho(x, y, z)$ in unità di a_0^{-3} , dove $a_0 \approx 5,29 \cdot 10^{-11}$ m è il raggio di Bohr.

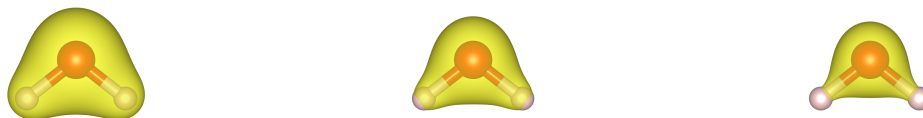
Un'isosuperficie di densità elettronica di livello ρ_0 è il luogo dei punti dello spazio in cui

$$\rho(x, y, z) = \rho_0,$$

cioè tutti quei punti in cui la densità elettronica assume un certo valore.

È possibile *calcolare* la densità elettronica delle molecole risolvendo le equazioni della meccanica quantistica. La Figura 1 mostra le isosuperfici di densità elettronica a tre livelli diversi della molecola di acqua. La densità elettronica di una molecola può essere contenuta in un file con estensione `cube`, la cui sintassi è descritta al link [\[1\]](#).

Un file di estensione `xyz` può invece contenere la struttura di una molecola. Al link [\[2\]](#) è spiegata la sintassi di questo tipo di file. Il file `struttura.xyz`, compatibile sia con Avogadro [\[3\]](#) che con VESTA [\[4\]](#), e disponibile nella cartella WeBeep del corso, contiene la struttura di una molecola di acqua.



(a) $\rho_0 = 0,1 a_0^{-3}$

(b) $\rho_0 = 0,2 a_0^{-3}$

(c) $\rho_0 = 0,3 a_0^{-3}$

Figura 1: Isosuperfici di densità elettronica di una molecola di acqua a tre livelli ρ_0 diversi. Insieme alle isosuperfici è rappresentata anche la molecola di acqua, dove la sfera rossa indica l'atomo di ossigeno e le sfere bianche gli atomi di idrogeno. Le isosuperfici sono rappresentate in giallo. La densità elettronica rappresentata è contenuta nel file **densita.cube**, presente nella cartella WeBeep del corso. Questo file può essere visualizzato con il programma VESTA [4].

Richiesta. Scrivere uno script Matlab che, dato un file `molecola.cube`, scrive un file `sistema.xyz` rispettando le seguenti condizioni:

1. il file `molecola.cube` contiene la densità elettronica di una molecola *qualsiasi*;
2. il file `sistema.xyz` contiene la struttura del sistema formato da (i) la molecola considerata al punto precedente (cioè quella di cui è data la densità elettronica) e (ii) un atomo di litio;
3. nel file `sistema.xyz`, l'atomo di litio è posto in un punto scelto casualmente tra tutti quelli con densità elettronica $\rho(x, y, z) = \rho_0 \pm \delta\rho$;
4. lo script permette all'utente di controllare direttamente i valori di ρ_0 e $\delta\rho$.

In aggiunta, è possibile estendere lo script per fare in modo che possa essere posizionato un numero qualsiasi di atomi di litio in maniera analoga a quella appena esposta. In questo caso devono sussistere le seguenti condizioni:

1. lo script permette all'utente di scegliere quanti atomi di litio posizionare;
2. le posizioni degli atomi di litio sono casuali;
3. le posizioni degli atomi di litio sono tali che due atomi di litio non hanno mai distanza minore di R ;
4. lo script permette all'utente di scegliere il valore di R .

Suggerimento: è utile visualizzare i file `cube` e `xyz` con VESTA per capire che cosa sta succedendo.

Relazione. Dopo aver ultimato lo script, scrivere un file `nome-della-squadra.pdf` contenente una relazione di quanto svolto. La relazione deve contenere una sezione in cui viene riportato il testo integrale dello script e di eventuali funzioni scritte *ad hoc*, una sezione di massimo una pagina in cui si illustra il funzionamento dello script (cioè si danno dettagli su come funziona lo script) e una sezione di massimo due pagine (comprese le eventuali figure) in cui si mostra un'applicazione dello script a un caso particolare.

Consegna. Per consegnare, produrre un file `nome-della-squadra.zip` contenente (i) la relazione `nome-della-squadra.pdf` e (ii) una cartella `script` in cui è riportato lo script funzionante completo di tutto il materiale necessario per usarlo (cioè, questa cartella deve contenere tutti i file necessari a compilare senza errori lo script in modo da ottenere l'output richiesto), quindi caricarlo entro la data di scadenza **nella cartella di consegna presente sul canale WeBeep del corso alla sezione Bacheca**. Nel file `nome-della-squadra.pdf`, la stringa `nome-della-squadra` è ottenuta considerando il nome della propria squadra, trasformando tutte le lettere maiuscole in lettere minuscole e sostituendo gli spazi con dei trattini (per esempio, la squadra *Siamo Proprio Adesso Davvero* scriverà la relazione con il nome `siamo-proprio-adesso-davvero.pdf` ed effettuerà la consegna caricando il file `siamo-proprio-adesso-davvero.zip`).

Note e bibliografia.

[1] <http://paulbourke.net/dataformats/cube/>.

[2] <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/docs/UsersGuide/xyz.html>.

[3] <https://avogadro.cc/>.

[4] <https://jp-minerals.org/vesta/en/download.html>.

Materiale. La cartella WeBeep Materiali > Esercitazioni > Gioco delle Sfide > Sfida Difficile > Materiale contiene il seguente materiale.

- `struttura.xyz`, la struttura di una molecola di acqua.
- `densita.cube`, la densità elettronica di una molecola di acqua.

Buon divertimento!

Gianluca