

Laboratorio 5

5 novembre 2021

Vogliamo ripetere il calcolo della funzione *pair correlation function* $g(r)$ pubblicata da Rahman in Phys. Rev. 136, A405 (1964) per l'Argon liquido a 90 K. Si prenda il codice di dinamica molecolare del docente `lj.cpp` che può essere usato per generare dei sets di coordinate. Importante: se si compila con il compilatore GNU meglio attivare le ottimizzazioni (`g++ -Os lj.cpp`) altrimenti risulterà estremamente lento. La configurazione finale viene scritta nel file `argonlast.txt` nel formato:

- `#NUMERO_ATOMI #LATO_CELLA_DI_SIMULAZIONE` (Angstrom)
- `#Rx Ry Rz` (Angstrom)

Scrivere un piccolo programma che legga tale file e generi la funzione $g(r)$ e la scriva su un file da visualizzare con *gnuplot*. A tale fine nella formula 98 della dispensa la funzione Dirac-delta va sostituita con una funzione gaussiana:

$$f(r) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(r-r_{ij})^2}{2\sigma^2}}$$

con σ parametro di *broadening* da scegliere in fase di esecuzione.