

Laboratorio 9

16 dicembre 2022

Vogliamo calcolare la funzione pair correlation function $g(r)$ pubblicata da Rahman in Phys. Rev. 136, A405 (1964) per l'Argon liquido a 94.4 K simulato tramite il potenziale di Lennard-Jones. Vogliamo usare l'algoritmo di Metropolis per simulare l'ensemble NVT. Si noti che basta considerare l'energia potenziale. Quindi non considereremo le velocità degli atomi ma solo le posizioni. Si può completare il programma già fornito dal docente. Bisogna usare le condizioni al contorno periodiche. Ad ogni passo del Metropolis per scegliere la configurazione di prova va spostato un solo atomo scelto a caso. Consideriamo uno spostamento massimo $\pm s_{max}$ lungo le tre direzioni Cartesiane. Notiamo che è molto più veloce calcolare direttamente la sola differenza di energia tra la configurazione di prova che la precedente che valutare l'energia della funzione di prova. Il codice genera un file in formato *xyz* che contiene l'ultima configurazione generata con Metropolis. Tale file può essere elaborato dal programma *gidierre.cpp*. I parametri da usare sono $N_{atomi} = 864$, $\rho = 1374 \text{ kgm}^{-3}$, $T = 94.4 \text{ K}$. Si consigliano $2 \cdot 10^5$ passi di rilassamento e almeno $1 \cdot 10^6$ passi di media. Fare anche un grafico dell'energia potenziale al variare dei passi di Montecarlo. Per il programma *gidierre.cpp* predere come distanza massima 20, $\sigma = 0.1$ e 100 intervalli. Si noti che la configurazione di partenza è particolarmente svantaggiosa essendo semi-cristallina e quindi vicina ad un minimo locale dell'energia potenziale.