

Nombre: Isabel Alfonso Marchante — 487 466 79 L

Ej: 1-52

En este problema se nos da el potencial que sufre un átomo dentro de una molécula (en mi caso una molécula de NaCl). Y se nos pide la distancia de equilibrio entre átomos.

El potencial que sufre el átomo es:

$$U_{tot} = U_{rep} + U_{culomb} = z\lambda e^{-\frac{r}{\rho}} - \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (1)$$

donde z es el número de primeros vecinos, λ y ρ son parámetros que caracterizan la interacción repulsiva y α es la cte. de Madelung. Trabajaré en unidades atómicas por lo que ρ y r vendrán en radios de Bohor (a_0), λ y U estarán en energía de Hartree (E_h) y $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1$.

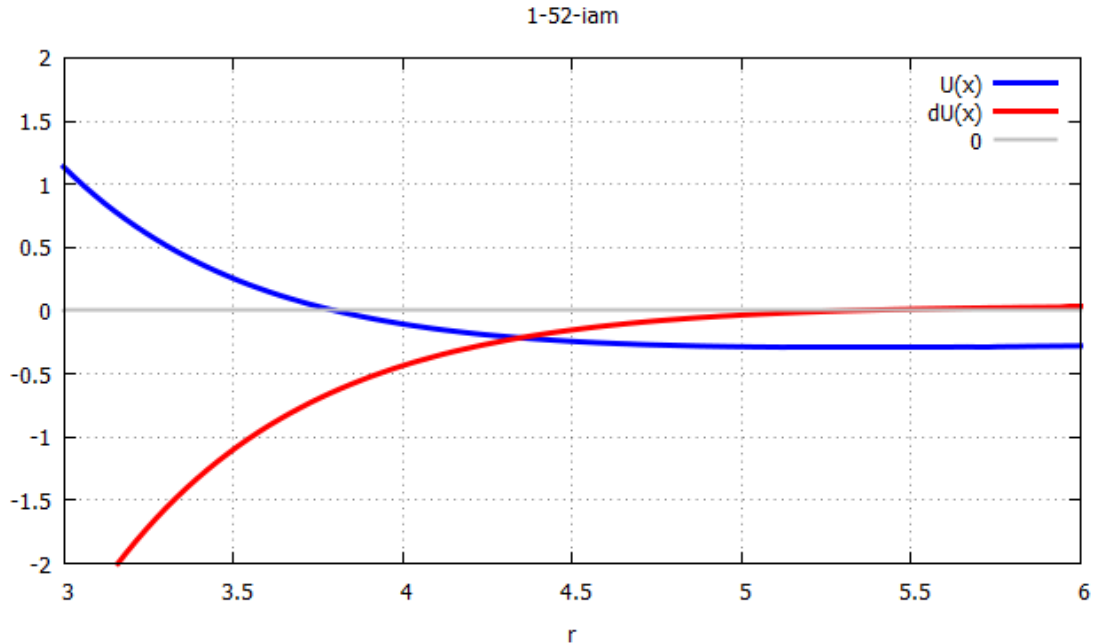
Nos piden r_{eq} , que es aquel que minimiza U_{tot} , por lo que tendremos que buscar los ceros de su derivada.

$$\frac{dU_{tot}}{dr} = -\frac{z\lambda}{\rho} e^{-\frac{r}{\rho}} - \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} \quad (2)$$

Además, para ello usaremos el método de Newton-Rapson, ya que es uno de los que más rápido converge, por lo que tendré que calcular la derivada de la función cuyos ceros quiero obtener, es decir, la segunda derivada de U_{tot}

$$\frac{d^2U_{tot}}{dr^2} = \frac{z\lambda}{\rho^2} e^{-\frac{r}{\rho}} + 2\alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^3} \quad (3)$$

El primer paso para aplicar este método es graficar la función para ver donde cae, más o menos, el cero que buscamos.



He graficado tanto el potencial como su derivada ya que, aunque busquemos el cero de la derivada vine bien saber la forma del potencial. Podemos comprobar que el mínimo de $U(x)$ equivale al cero de $dU(x)$. Mirando la gráfica nos damos cuenta de que un buen punto para empezar la iteración es 4.75.

Construimos el programa. Trabajamos con una tolerancia de 10^{-4} . Obtenemos el valor de $r_{eq} = 5.32288361$ $a_0 = 2.816$ Å con 5 interacciones.

Si buscamos en la literatura podemos encontrar que la distancia de equilibrio para una molécula de NaCl es de 2.36 Å, la discrepancia con nuestro resultado se debe a la simplicidad del modelo más que a los métodos computacionales empleados.

0.1 Programa fortran

```

1
2 * 1-52-iam.f
3
4 *****
5
6 * Encontrar la distancia de equilibrio para una molecula de NaCl
7
8 * Isabel Alfonso Marchante
9
10 *****
11
12     include 'New-Rap-iam.f'
13
14     external f , fp
15
16 * Defino los parametros de la iteracion
17
18     x0 = 4.75 !valor inicial para empezar la interacion
19     tol = 1.0e-4 !tolerancia
20     kmax = 200 !numero de iteraciones maximas
21
22     call NewRap(f,fp,x0,tol,kmax,k,x)
23     write(*,*) k,x
24     write(*,*)
25     write(*,*) 'programa finalizado'
26
27     stop
28     end
29
30 *****
31     function f(x) ! funcion cuyos ceros quiero calcular
32 *****
33
34 * Defino las cte. Voy a trabajar en unidades atomicas
35     real lmb
36
37     lmb = 40.15
38     rho = 0.607
39     z = 6.0
40     alpha = 1.747565
41
42     f = alpha / x**2 - z *lmb/rho * exp(-x/rho)
43
44     return
45     end
46
47 *****
48     function fp(x) ! Derivada de la funcion
49 *****

```

```

50
51 * Vuelvo a definir las cte. ya que son distintos "subprogramas" y no se comunican entre
    ellos
52
53     real lmb
54
55     lmb = 40.15
56     rho = 0.607
57     z = 6.0
58     alpha = 1.747565
59
60     fp = z * lmb /rho**2 * exp(-x/rho) - 2 * alpha/x**3
61
62     return
63 end

```

0.2 Subrutina Newton-Rapson

```

1
2 * New-Rap-iam.f
3
4 *****
5
6 * Metodo de Newton Rapshon- Subrutina
7
8 * Isabel Alfonso Marchante 25-01
9
10 *****
11
12     subroutine NewRap(f , fp , x0 , tol , kmax , k , x)
13
14     external f,fp ! fp , funcion prima , funcion derivada
15     real f , fp
16
17
18     do k=1,kmax
19         x = x0 - f(x0)/fp(x0)
20         dif = abs(2.0 * (x-x0)/(x+x0)) ! criterio de error relativo
21         if (dif .lt. tol) goto 100
22         x0=x
23     end do
24
25     write(*,*)
26     write(*,*) 'num. iter.=',kmax,' x=',x
27     write(*,*) 'no se alcanzo la precision deseada'
28     stop
29
30 100 write(*,*) 'num. iter.=',k,' x=',x
31     write(*,*) 'se alcanzo la precision deseada'
32     stop
33
34
35 end

```

0.3 Código Gnuplot

```
1
2 #1-52-iam.plt
3
4 #Datos
5 z = 6.0
6 alpha = 1.747565
7 lmb = 40.15
8 rho = 0.607
9
10 #Defino las funciones
11 U(x) = z * lmb * exp(-x/rho) - alpha/x
12 dU(x) = -z * lmb/rho * exp(-x/rho) + alpha/x**2
13
14 #Defino el tipo de lineas
15 set style line 1 lt 2 lc rgb "gray" lwi 2
16 set style line 2 lt 2 lc rgb "blue" lwi 3
17 set style line 3 lt 2 lc rgb "red" lwi 3
18
19 #Nombro la grafica y los ejes
20 set title "1-52-iam"
21 set xlabel "r"
22
23 #Escojo los limites y grafico las funciones
24 set xrange [3:6]
25 set yrange [-2:2]
26 plot U(x) ls 2 , dU(x) ls 3 , 0 ls 1
```