

Esercizio 2: Atomi

Nell'intorno di un atomo l'energia di interazione tra l'atomo stesso e un altro atomo "sonda" che gli viene avvicinato è dato dalla formula

$$E = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$$

dove A e B sono parametri caratteristici dell'atomo mentre r è la distanza Euclidea tra l'atomo e la sonda.

E' data una configurazione tridimensionale di alcuni atomi, supposti puntiformi e si vuole trovare il punto di minima energia a cui la sonda (anch'essa supposta puntiforme) tende a stabilizzarsi per effetto delle interazioni con gli atomi stessi.

Formulare il problema, classificarlo e risolverlo con i dati del file ATOMI.TXT.

=====

Gli atomi sono 10.

Le posizioni degli atomi sono le seguenti:

Atomo	x	y	z
1	3.2	2.5	4.8
2	2.1	3.7	8.4
3	7.5	2.5	5.0
4	6.6	1.2	4.5
5	0.8	5.1	5.6
6	6.3	8.8	3.5
7	2.4	1.0	3.1
8	1.2	4.6	9.0
9	8.5	7.8	1.5
10	4.1	9.3	0.9

I valori dei parametri A e B sono i seguenti:

Atomo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
A	1.0	1.1	2.1	3.0	0.5	0.2	0.8	1.1	1.5	1.7
B	200	400	320	250	400	200	120	300	100	500