

# Fisica Computazionale: Esercitazione 6

## 1 Introduzione alla dinamica molecolare

1. implementa l'algoritmo di Velocity-Verlet e applicalo al problema dell'oscillatore armonico visto nell'esercitazione 3. Confronta l'errore sulla posizione e sulla conservazione dell'energia con i metodi usati in precedenza.
2. considera un sistema di  $N$  oscillatori armonici in 3 dimensioni e scrivi un codice per fare dinamica molecolare usando l'algoritmo di Velocity Verlet. Struttura il codice in modo che l'integratore evolva le 3 coordinate di ciascuna particella usando

$$\begin{aligned}\vec{F}_i &= -\nabla_i U(r) = -\left(\frac{\partial U(r)}{\partial x}, \frac{\partial U(r)}{\partial y}, \frac{\partial U(r)}{\partial z}\right) \\ &= -\left(\frac{\partial r}{\partial x}, \frac{\partial r}{\partial y}, \frac{\partial r}{\partial z}\right) \frac{dU(r)}{dr} = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{dU(r)}{dr}\end{aligned}$$

dove il potenziale é dato da

$$U(r) = \frac{k}{2} r^2$$

e abbiamo usato la definizione  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ . Per l'oscillatore questo non é strettamente necessario ma in questo modo il codice può essere riutilizzato facilmente in casi dove il potenziale non é più separabile sulle tre componenti cartesiane.

Per inizializzare le velocità, campiona le componenti dalla distribuzione di Maxwell-Boltzmann a temperatura  $k_B T = kl^2$ . Dove  $kl^2$  é l'unità di energia per il sistema (vedi esercitazione 3). Considera due modi di inizializzare le coordinate del sistema

- (a) tutte le particelle partono nel minimo dell'energia potenziale
- (b) campiona le posizioni iniziali dalla stessa distribuzione usata per le velocità

Calcola l'andamento di energia e temperatura in funzione del tempo. Quando vedi equilibrare?

3. ora prova a fissare la velocità del centro di massa a zero e scegli la varianza per le velocità in modo da avere la stessa temperature media di prima.