

Fisica Computazionale: Esercitazione 8

- calcola l'equazione di stato per un fluido di Lennard-Jones usando il teorema del viriale. Fai un grafico del fattore di compressibilità

$$\frac{P}{\rho k_B \langle T \rangle} = 1 + \frac{1}{3k_B \langle T \rangle} \langle W \rangle, \quad (1)$$

in funzione della densità ρ (prendi un intervallo che includa tutte e tre le fasi). Cerca di ottenere per ogni punto una temperatura il più vicino possibile a $\hat{T} = 1.1$ modificando la scelta delle velocità iniziali (fai un grafico della temperatura media ottenuta $\langle T \rangle$ per le densità usate). Per controllare di essere vicini al limite termodinamico fai almeno due conti con numero di particelle N diverso e controlla che le osservabili non varino apprezzabilmente.

BONUS

A lezione abbiamo visto che la funzione di distribuzione radiale può essere scritta come

$$g(r) = \frac{1}{\rho} \lim_{\delta r \rightarrow 0} \frac{N(r, \delta r)}{V(r, \delta r)} \quad (2)$$

dove $\rho = N/V$ è la densità media del sistema, $N(r, \delta r)$ il numero di particella ad una distanza $x \in [r - \delta r/2, r + \delta r/2]$ da una particella fissata e $V(r, \delta r)$ il volume del guscio sferico fra $r - \delta r/2$ e $r + \delta r/2$. Per stimare $g(r)$ possiamo prendere un δr finito e fare un istogramma centrato con $M = (L/2)/\delta r$ su M intervalli di larghezza δr e centrati in $r_k = (2k+1)\delta r/2$ con $k \in \{0, \dots, M-1\}$.

Nota che per fare in modo che questo istogramma sia normalizzato correttamente quando δr non è zero, invece di usare il volume infinitesimo

$$V(r, \delta r) = 4\pi r^2 \delta r,$$

risulta più conveniente usare il valore esatto

$$V(r, \delta r) = \frac{4}{3}\pi \left(r + \frac{\delta r}{2}\right)^3 - \frac{4}{3}\pi \left(r - \frac{\delta r}{2}\right)^3.$$

- implementa il calcolo della funzione di distribuzione radiale $g(r)$ e ottieni il suo grafico in ciascuna delle tre fasi del fluido di Lennard-Jones. Quanto grande devi prendere la scatola di simulazione per avere $g(r) \approx 1$ nel liquido e nel gas?

- usa la $g(r)$ calcolata prima per trovare la correzione all'energia compatibile con la modifica del potenziale che avete fatto