

Fisica Computazionale 2003-04

Laboratorio numerico

16 giugno 2004

**Codice AIMD per la molecola di idrogeno:
ricerca dinamica del minimo dello stato elettronico.**

1. Scaricare il file `aimd.tgz` che si trova in "<http://www.aquila.infn.it/htdocs/pierleoni/AIMD/>" e scompattare l'archivio. Il codice **elec_md.f** esegue una dinamica classica fittizia per i coefficienti C_α dello sviluppo dell'orbitale molecolare di stato fondamentale della molecola H_2 in una base formata da 4 GTO centrati su ciascun protone (la σ delle gaussiane di base è assegnata). Il codice **nucl_md.f** integra le equazioni del moto dei nuclei e degli elettroni accoppiate per studiare la dinamica Car-Parrinello.
2. A partire da una formulazione analitica scelta delle equazioni del moto, correggere il codice **elec_md.f**. In particolare ridefinire le quantità λ (moltiplicatore di Lagrange) e γ (frizione) in modo da renderle indipendenti dal passo h .
3. Per una data distanza nucleare, eseguire lo studio di convergenza per scegliere il passo h , con e senza frizione. L'introduzione della frizione modifica la scelta ottimale di h ?
4. Descrivere la dinamica del sistema al variare del coefficiente di frizione γ , in termini dell'andamento temporale dell'energia.
5. Scrivere una routine per calcolare l'orbitale molecolare dello stato fondamentale (nella base assegnata).
6. Confrontare i risultati per l'energia e l'orbitale molecolare con quelli che si ottengono con la procedura di diagonalizzazione, per diversi valori della distanza nucleare.