

Fisica Computazionale 2003-04

Laboratorio numerico

1. Oscillatore armonico e potenziale a doppia buca unidimensionale - integrazione delle equazioni del moto tramite l'algoritmo di Verlet.

- Oscillatore armonico
 - a) Studiare la conservazione dell'energia in funzione del passo di integrazione.
 - b) Confrontare la traiettoria numerica con la soluzione analitica nello spazio (q, p) al variare del passo.
 - c) Calcolare $\langle q \rangle_E$, $\langle q^2 \rangle_E$, e la funzione di distribuzione della posizione $P(q|E)$ (istogramma) come medie temporali al variare dell'energia E .
- Potenziale a doppia buca: $V(q) = 2\omega^2(q^4 - 2q^2 + 1)$
 - a) Ripetere lo studio per la scelta del passo di integrazione
 - b) Discutere il moto al variare dell'energia iniziale.
 - c) Calcolare $\langle q \rangle_E$, $\langle q^2 \rangle_E$, e la funzione di distribuzione della posizione $P(q|E)$ (istogramma) come medie temporali al variare dell'energia E .

2. Dinamica molecolare per il sistema Lennard-Jones: proprietà statiche.

- Dinamica microcanonica (NVE).
 - a) Calcolare e stampare la velocità del centro di massa nel file `lj.prt`, cambiando la routine `sample.f`
 - b) Studiare la conservazione dell'energia e della quantità di moto del centro di massa per un sistema LJ di 256 particelle a densità 0.75, in funzione del passo di integrazione e scegliere il valore ottimale.
 - c) Studiare il valore ottimale del passo al variare della densità (e/o temperatura).
 - d) Calcolare le medie temporali di energia interna, temperatura, pressione etc. Le medie dipendono dalla lunghezza temporale del run? Discutere.
 - e) Calcolare la distribuzione della velocità e confrontare con la distribuzione di Maxwell-Boltzmann.
- Dinamica di Nosè-Hoover (NVT).
 - a) Studiare l'ampiezza delle fluttuazioni al variare della massa Q del termostato e discutere una scelta ottimale di Q . Dipende dal numero di particelle?
 - b) Confrontare la distribuzione dell'energia cinetica con quella ottenuta precedentemente in NVE a stessi valori di densità e temperatura.
 - d) Studiare il comportamento in temperatura del sistema a densità costante e localizzare la transizione solido-liquido tramite la $g(r)$.
 - e) Tracciare l'equazione di stato $p(T, \rho, N)$ lungo una isoterma a N costante.

3. Dinamica molecolare per il sistema Lennard-Jones: proprietà dinamiche.

- Confronto dinamica microcanonica e di Nosè-Hoover.
 - a) Calcolare $C_{vv}(t)$, il suo integrale temporale e lo scarto quadratico medio della posizione $\langle \Delta r^2(t) \rangle$, per il sistema nello stato liquido (ad esempio a $\rho = 0.8, T = 1.5$) con dinamica NVE (microcanonica).
 - b) Ripetere il calcolo con la dinamica NVT (Nosè-Hoover) per quattro valori di Q nel range $[0.01, 10]$ e discutere il risultato.
- Calcolo del coefficiente di diffusione.
 - a) Confrontare il valore del coefficiente di diffusione ottenuto dall'integrale di Kubo e dallo scarto quadratico medio negli esperimenti di cui sopra.
 - b) Ripetere l'esperimento per uno stato termodinamico in fase solida e discutere le differenze osservate.