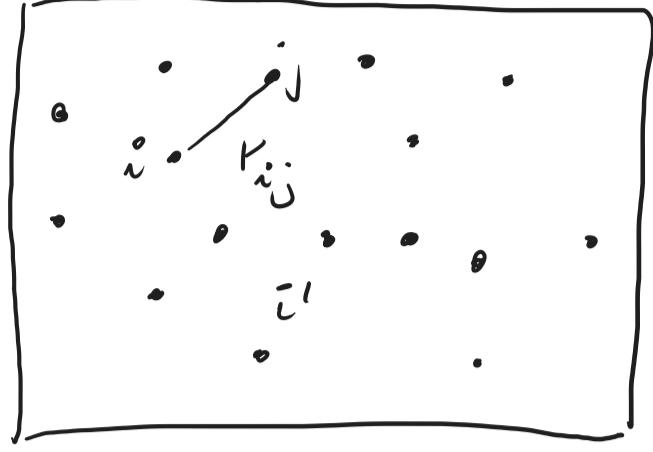


SIMULAZIONI DI LIQUIDI, GAS, SISTEMI ATOMICI
 TRAMITE DINAMICA MOLECOLARE

-PAIR CORRELATION FUNCTION $g(r)$

es.



$$g(r) = \left\langle \frac{1}{4\pi r^2} \frac{V}{N^2} \left(\sum_{i=1, N} \sum_{\substack{j=1, N \\ j \neq i}} \delta(r - r_{ij}) \right) \right\rangle$$

Ho che $\int_{R_1}^{R_2} \sum_{j \neq i} \delta(r - r_{ij}) \approx$ # atomi con distanze tra R_1 ed R_2
 per R_1, R_2 grandi

$$\int_{R_1}^{R_2} 4\pi r^2 \frac{N}{V} g(r) dr = \text{# medio di atomi ed distanze tra } R_1 \text{ e } R_2 \text{ da un atomo dato}$$

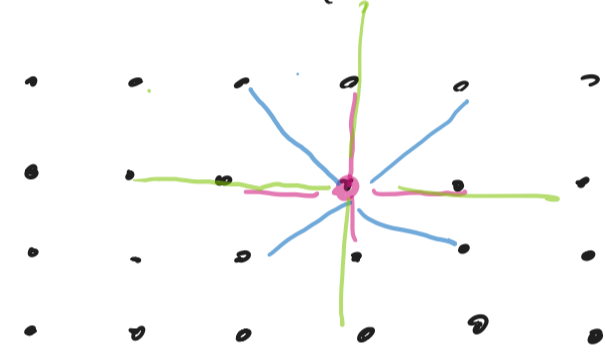
e per un sistema omogeneo

sia R_1 grande e $R_2 = R_1 + dr$

~~$$\int_{R_1}^{R_2} 4\pi r^2 \frac{N}{V} g(r) dr = \int_{R_1}^{R_2} 4\pi r^2 \frac{N}{V} dr$$~~

$$g(R_1) = 1 \quad \text{per } R_1 \text{ grande}$$

NB cristallo



COSTANTE DI DIFFUSIONE

se $g(\vec{r}, t)$ densità media in \vec{r} al tempo t
 NB quantità macroscopica

$$\frac{\partial g(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 g(\vec{r}, t)$$

$$\langle r^2 \rangle = 6Dt$$

$$D = \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{d}{dt} \frac{1}{6} \frac{1}{N} \sum_{i=1, N} |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t_0=0)|^2$$

CONFIGURAZIONE INIZIALE

Voglio prendere le velocità iniziali distribuite secondo la distribuzione di Maxwell-Boltzmann

$$f(v) = 2^{1/2} \pi^{-1/2} m^{3/2} (k_B T)^{-3/2} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}$$

ALGORITMO ACCETTA-NEGA

1) prendo \vec{v}_{trial} distribuito uniformemente in volume detto v_{trial}

2) Definisco v_{max} tale che $f(v_{max})$ è massima

3) prendo il numero casuale c distribuito uniformemente tra 0 e 1

4) se $c < \frac{f(|\vec{v}_{trial}|)}{f(v_{max})}$ allora prendo \vec{v}_{max} altrimenti torno a 1

Dimostrazione

se genero N tentativi, per $N \rightarrow +\infty$
 Numero di \vec{v}_{trial} presi tra v e $v+dv$

$$\propto \frac{f(v)}{f(v_{max})} N$$