

Report simulazioni GC x LJ

Studiamo un sistema di particelle interagenti con il potenziale LJ con $r_{cut} = 2.5\sigma$. Non applichiamo correzioni long-range ai dati calcolati.

Si consiglia, all'inizio, di disattivare le liste di Verlet ed effettuare sempre N^2 interazioni.

Si consiglia inoltre di verificare che la parte di accettazione delle mosse che cambiano il numero di particelle funzioni provando a simulare un gas ideale (cioè mettendo ϵ_{LJ} a zero). Dovete trovare che $\rho = z$ per qualsiasi T .

1 T=1.2

Studiamo una scatola con volume 9.0755σ alla temperatura $T = 1.2$ per valori del potenziale chimico uguali a $z = 0.06, 0.063, 0.064, 0.0645, 0.065, 0.07$. Definiamo passo MC 1000 traslazioni e 10 tentativi di inserimento/eliminazione. Dopo ogni passo conserviamo N in un file per poter a posteriori visualizzare $N(t)$ e calcolare $P(N)$.

- Avete accesso a $P(0)$? Come mai?
- Provare a confrontare la $P(N)$ calcolata a $z = 0.065$ utilizzando le $P(N)$ trovate a più piccoli valori di z .

La figura mostra i risultati

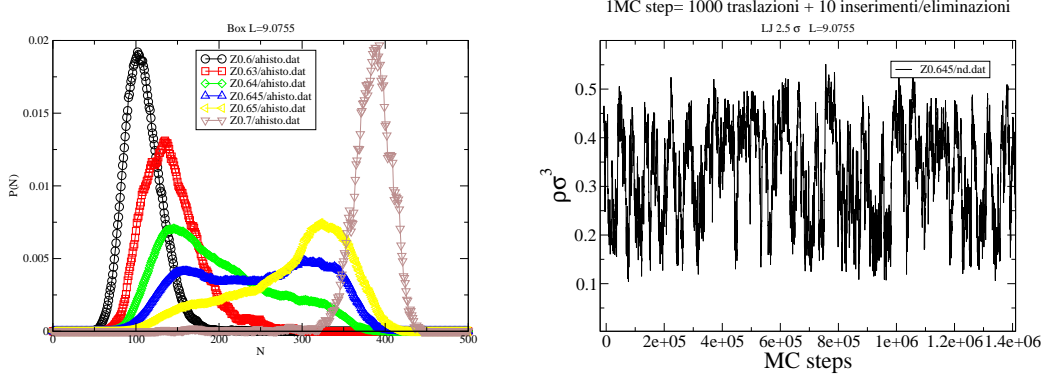


Figure 1: $P(N)$ per varie z e $N(t)$ per due diversi valori di z

2 T=1.1

Ripetiamo lo stesso tipo di calcolo per $T = 1.1$ Proviamo i valori $z = 0.047$, $z = 0.0475$ e $z = 0.048$, iniziando sia da una scatola vuota che da una scatola con 400 particelle (usare configurazioni create in precedenza). Cosa si osserva ?