

Differenza in energia libera tra LJ e SS a  $T^* = 2$  e  $\rho^* = 1$

Studiamo, con integrazione termodinamica, la differenza di energia libera tra  
 (i) un sistema di particelle interagenti con il potenziale LJ con  $r_{cut} = 2.5\sigma$ . Non applichiamo correzioni long-range ai dati calcolati.

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad r < 2.5\sigma$$

(ii) un sistema di particelle interagenti con il potenziale SS con  $r_{cut} = 2.5\sigma$ .

$$V_{SS}(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right] \quad r < 2.5\sigma$$

a  $T^* = 2$  e  $\rho^* = 1$ . Simuliamo un sistema di 300 particelle.  
 Definendo  $V_{LJ}(r) + W(r) = V_{SS}(r)$ , possiamo scrivere

$$H_\lambda = V_{LJ}(r) + \lambda W(r)$$

così che per  $\lambda = 0$  abbiamo il potenziale LJ e per  $\lambda = 1$  abbiamo il potenziale SS.  
 La figura mostra i risultati per  $\langle W \rangle_\lambda$  vs.  $\lambda$ .

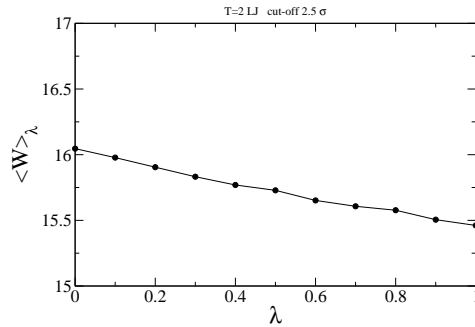


Figure 1:  $\langle W \rangle_\lambda$  vs.  $\lambda$

L' integrale  $\int_0^1 \langle W \rangle_\lambda d\lambda = 15.73$ . Quindi

$$\Delta\beta F = 15.73$$

Domanda: Quanto varrebbe  $\Delta\beta F$  se avessimo approssimato  $\langle W \rangle_\lambda$  con  $\langle W \rangle_{\lambda=0}$  ?