

Report simulazioni GC US

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

La temperatura e' $T = 1.1$ e $z = 0.04693$. Il lato della scatola 9.0755σ . Si suggerisce di definire 1 passo MC come 1000 tentativi di spostamento e 10 tentativi di inserimento/cancellazione di particella.

E' stato precedentemente generato un file che contiene la $P_{US}(N)$ stimata. Questo file e' scaricabile dal sito e contiene $P_{US}(N)$ per $0 \leq N \leq 520$. La $P_{US}(N)$ e' anche mostrata nella figura seguente

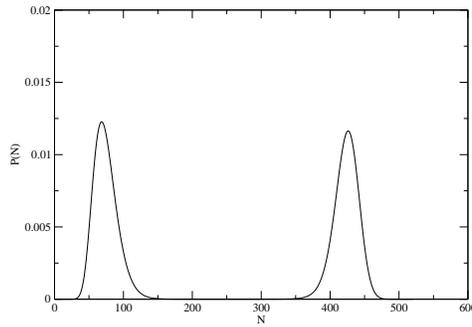


Figure 1: $P(N)$ da usare per US

- Effettuare la simulazione senza US (se non gia' fatto precedentemente) e calcolare $P_{LJ}(N)$.
- Trovare la $P_{SIM}(N)$ che risulta dalla simulazione US-GC a $T = 1.1$ e $z = 0.04693$ per $0 \leq N \leq 500$, utilizzando la $P_{US}(N)$ fornita.
- Utilizzare $P_{SIM}(N)$ per calcolare la $P_{LJ}(N)$ del modello LJ a $T = 1.1$ e $z = 0.04693$ per $0 \leq N \leq 500$. Confrontare con quella trovata in assenza di US.
- Utilizzare $P_{LJ}(N)$ per calcolare con *histogram reweighting* $P_{LJ}(N)$ per vari valori di z , in modo da generare $\langle N \rangle$ da circa 0 a circa 500.
- Calcolare da $P_{LJ}(N)$ l'equazione di stato ($P(V)$) del modello LJ.
- Confrontare la equazione di stato trovata con la P calcolata in simulazioni MC (NVT) standard.
- Scrivere metodi usati e figure dei risultati in un piccolo report (in pdf) da inviare a francesco.sciortino@uniroma1.it con subject REPORT GCUS