

Metodo di Widom x LJ

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

Scegliamo $T = 2$, 300 particelle, densita' rispettivamente $\rho^* = 0.55$ (facile) e $\rho^* = 1.0$ (difficile).

Calcoliamo

$$\beta\mu^{ex} = -\ln \langle e^{-\beta W} \rangle$$

Se vogliamo trovare lo z da usare in una simulazione GC per ottenere lo stesso stato (e verificare il calcolo di Widom) dobbiamo ricordarci che

$$z = e^{\beta\mu^{ig} + \beta\mu^{ex}} = e^{\beta\mu^{ig}} e^{\beta\mu^{ex}} = \rho e^{\beta\mu^{ex}}$$

Troviamo cosi' $\beta\mu(T = 2, \rho = 0.55) \approx 0.2$ e $\beta\mu(T = 2, \rho = 1.0) \approx 7$, o equivalentemente, a $\rho = 0.555$, $e^{\beta\mu} = 1.22$ e $z = 0.55 * 1.22 = 0.67$

- Perche' a $\rho = 1$ e' molto piu' difficile stimare $\beta\mu$?

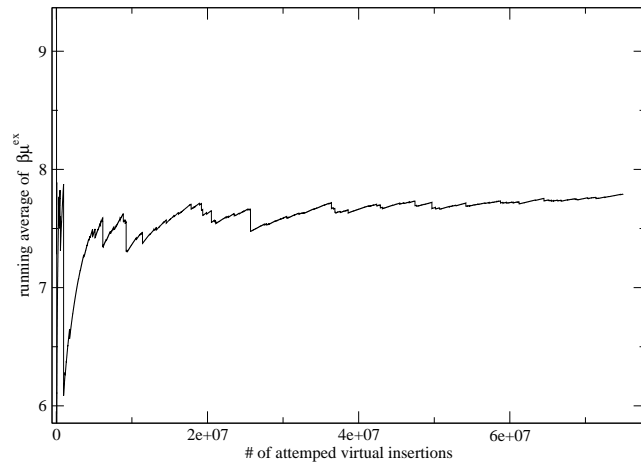
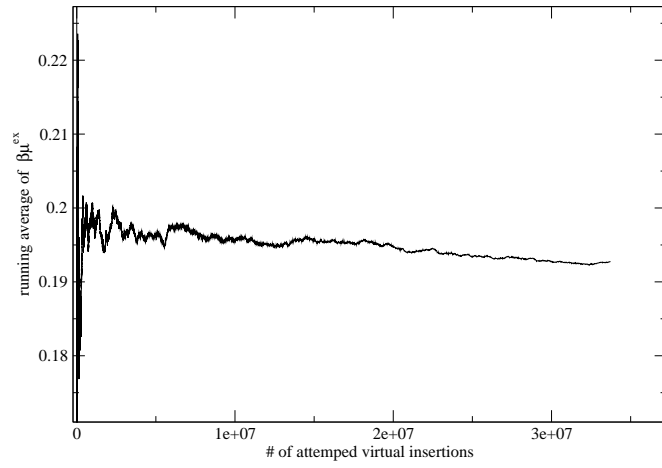


Figure 1: Running average of $\beta\mu^{ex}$ alle due densita'. Notare il diverso numero di tentativi di inserimento e la diversa convergenza del risultato