1. Tehtävä

$$V_{corr} = 2\pi N\rho \int_{r_c}^{\infty} drr^2 V(r)$$

$$= 2\pi N\rho D e^{\alpha r_0} \int_{r_c}^{\infty} drr^2 e^{-2\alpha r} e^{\alpha r_0} - 2r^2 e^{-\alpha r}$$

Lasketaan välissä:

$$\int_{b}^{\infty} drr^2 e^{-ar} = \frac{b^2}{a} e^{-ab} + \frac{2}{a} \int_{b}^{\infty} drre^{-ar}$$

$$= \ldots = \frac{1}{a} e^{-ab} \left(b^2 + \frac{2}{a} b + \frac{2}{a^2} \right)$$

Siispä:

$$V_{corr} = 2\pi N\rho D e^{\alpha r_0} \left(e^{\alpha r_0} \frac{1}{2\alpha} e^{-2\alpha r_c} \left(r_c^2 + \frac{1}{\alpha} r_c + \frac{1}{2\alpha^2} \right) - \frac{2}{\alpha} e^{-\alpha r_c} \left(r_c^2 + \frac{2}{\alpha} r_c + \frac{2}{\alpha^2} \right) \right)$$

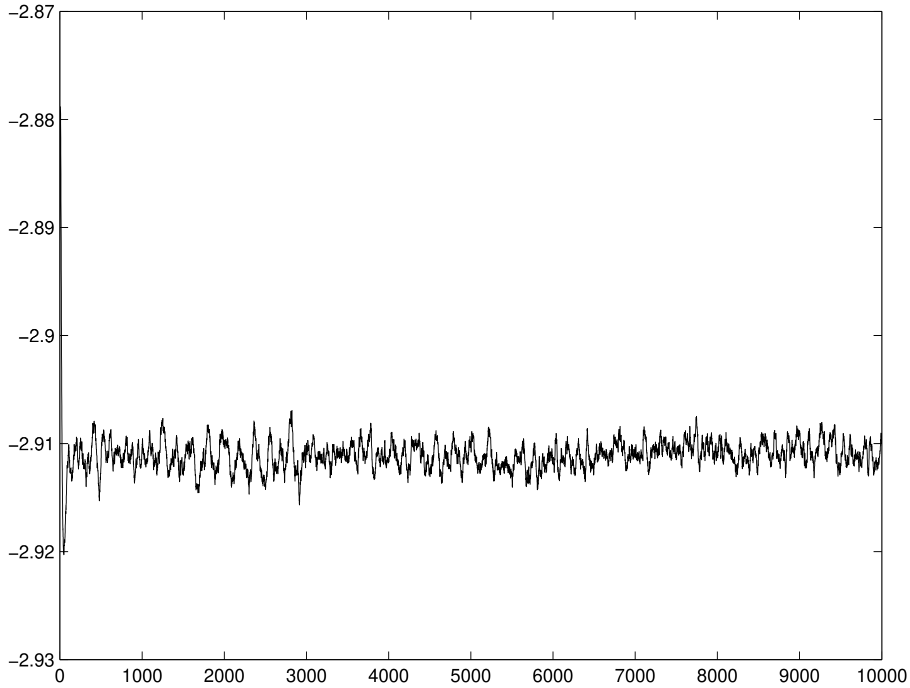
2. Tehtävä Atomitiheys on $\frac{4}{a^3} = 0,0843 \frac{1}{ang^3}$ (a=3.62 ang). Taulukossa on viime tehtävän perusteella lasketut korjaukset ja simulaatiosta saadut energiat. Tein kaikki simut 10x10x10 yksikkökopin suuruisella kopilla.

r_c	$\frac{E_{pot}}{n}/eV$	$\frac{E_{corr}}{n}/eV$	summa / eV
3	-1.509	-2.70	-4.2
4	-2.115	-1.26	-3.38
5	-3.035	-0.49	-3.53
6	-3.391	-0.17	-3.561
7	-3.499	-0.059	-3.558
8	-3.522	-0.019	-3.541
9	-3.535	-0.0061	-3.5411
10	-3.541	-0.0019	-3.543
11	-3.542	-0.00059	-3.541
12	-3.542	-0.00018	-3.542

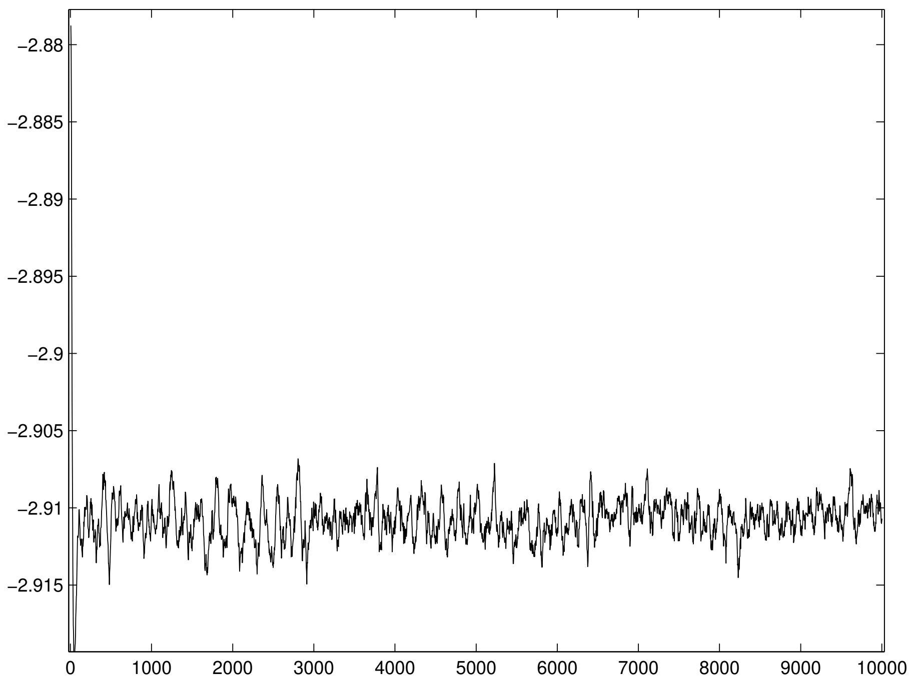
Taulukko 1: Energiat ja korjaukset per atomi

Ilman korjausta 0,1 eV:n tarkkuuteen päästään siis 7 ang katkaisulla ja korjauksen kanssa riittää 5 ang. Jos koodiin lisäisi tällaisen vakiokorjauksen atomien liike ei muuttuisi mihinkään, potentiaalienergia hieman. Suuremmilla lämpötiloilla voi tapahtua tiheyden muutoksia, jolloin korjaus olisi väärä ellei sitten laskisi tiheyttä erikseen, mikä ei varmaankaan ole kovin järkevää.

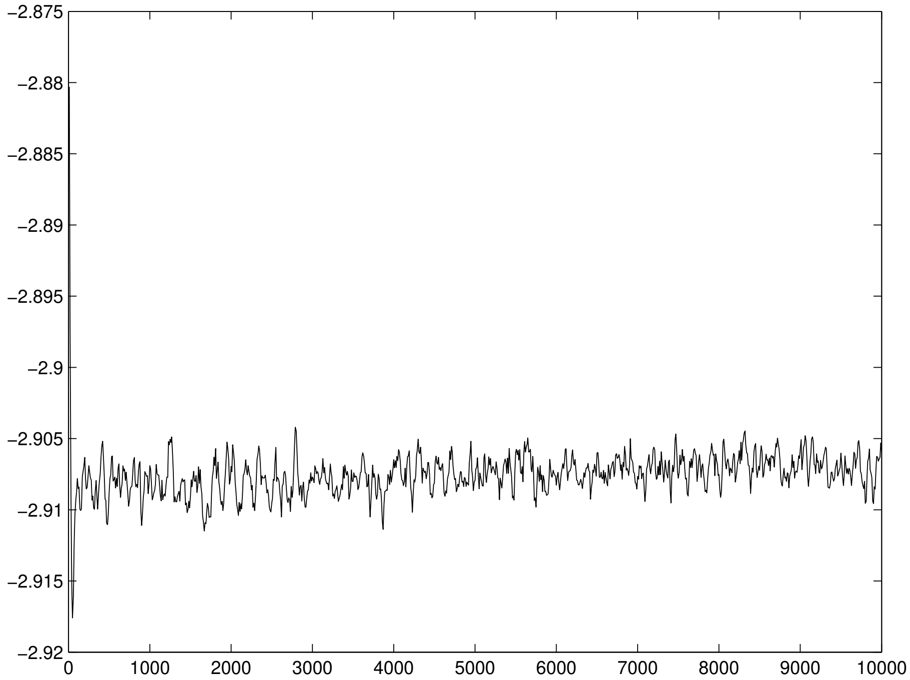
3. Tehtävä 30 ja 100 fs:n aika-askelilla atomit pääsevät liikkumaan niin paljon, että ne joutuvat välillä todella lähelle toisiaan ja saavat "tyhjästä" potentiaalienergiaa, näin lämpötila kasvaa.



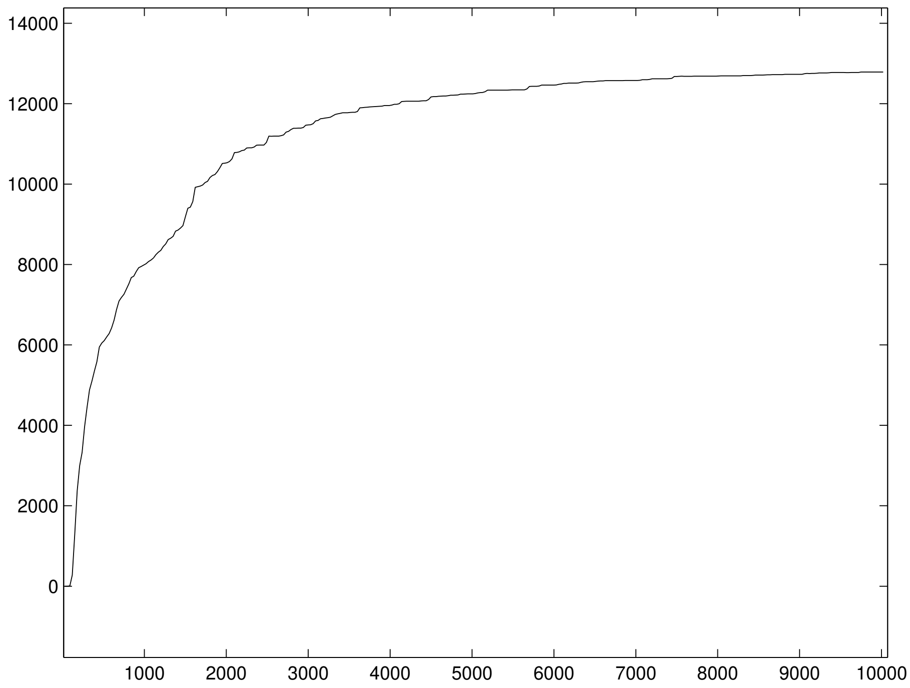
Kuva 1: 1 fs



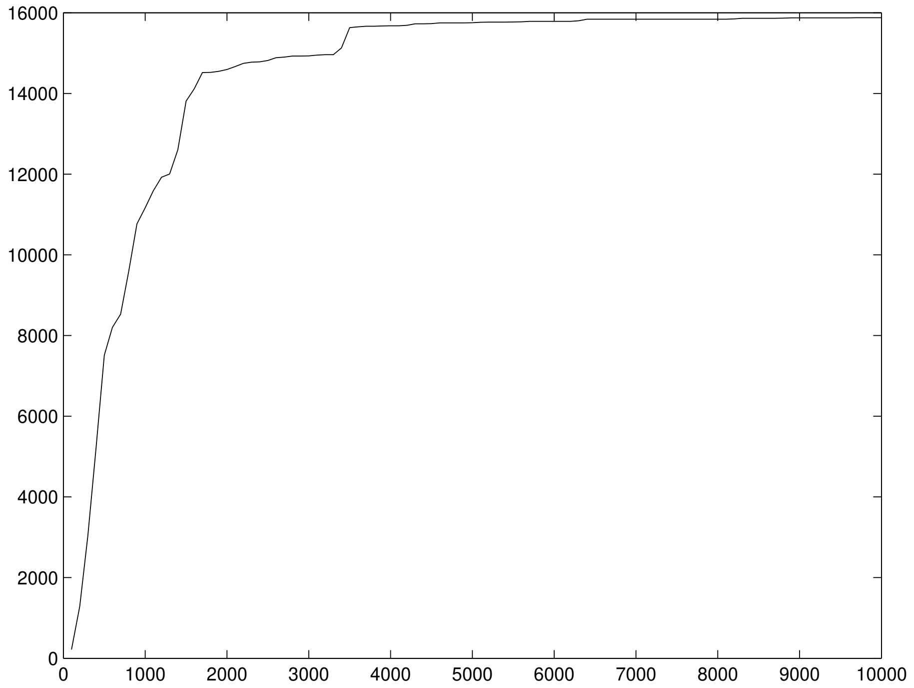
Kuva 2: 3 fs



Kuva 3: 10 fs



Kuva 4: 30 fs


16000
14000
12000
10000
8000
6000
4000
2000
0
0
1000
2000
3000
4000
5000
6000
7000
8000
9000
10000

Kuva 5: 100 fs