

# meccanica classica

*Fulvio Ciriaco*

11 novembre 2025



# termodinamica statistica

$$Z(\beta, V, n_i) = \sum_i^{\text{stati}} e^{-\beta E_i}$$

$$Z(\beta, V, n_i) = \int e^{-\beta E(p, x)} dp dx = \int e^{-\beta p^2/2m} e^{-\beta V(x)} dp dx$$

$$\beta = \frac{1}{T} \quad \text{unità energetiche di } T = KT_{tc}$$

$$U = \langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$P = T \frac{\partial \ln Z}{\partial V}$$

$$A = -\beta \ln Z$$

$$S = -\frac{\partial A}{\partial \beta} \quad S_{tc} = KS$$



# dinamica molecolare

$$\ddot{x} = F$$

le traiettorie campionano lo spazio delle fasi,

$$\langle f \rangle = \int_{\text{traiettorie}} f(t) dt$$

integrazione: verlet, leapfrog

$$x_{i+1} = x_i + v_i \tau + \frac{1}{2} a_i \tau^2$$

$$v_{i+1} = v_i + \frac{1}{2} (a_i + a_{i+1}) \tau$$



# termostati e barostati

insiemi statistici: microcanonico, canonico, grancanonico.

**langevin** un termostato formato da un accoppiamento formale di ogni massa con due sistemi, uno di frizione e uno di interazione con un oscillatore a temperatura costante. versione con barostato.

**berendsen** un termostato molto semplice che riscalda le velocità con continuità per riportare il sistema alla temperatura desiderata.

**nosè-hoover** termostato che modifica l'hamiltoniana del sistema aggiungendo gradi di libertà per produrre un sistema a temperatura fissa. versione con barostato.



$$Z(\beta, V, n_i) = \int e^{-\beta E(p, x)} dp dx = \int e^{-\beta p^2/2m} dp \int e^{-\beta V(x)} dx$$
$$Z_R = \int p(V(x)) dx$$

catene di Markov:  $p(s_i \rightarrow s_j)$

metropolis:

$$p(s_i \rightarrow s_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } E_j \leq E_i \\ e^{\beta(E_i - E_j)} & \text{se } E_j > E_i \end{cases}$$



# campi di forza

sono modelli semplificati delle interazioni nucleari.

**biochimica** campi specializzati per l'uso in biochimica, hanno coordinazione fissa e tipicamente un'alta specializzazione per pochi tipi di elementi (C, H, N, O, S, P, alogen) nei loro vari ambiti. Ulteriori specializzazioni sono dedicate a proteine e catene nucleiche. Amber, GROMOS, Gaff, Charm.

**metalli** campi di forza per elementi in sistemi molto densi e con scarsa dipendenza dagli angoli di legame: sono di solito ispirati al funzionale densità. esempi: EMT, EAM.

**universali** UFF, bah!

**reattivi** a coordinazione variabile permettono di seguire eventi di frammentazione e ricombinazione, esempi Stillinger-Weber (C, Si), ReaxFF.















