

# 计算机模拟物理作业 3（本）

2023 年 11 月 01 日

注意：所有无量纲量皆由折合单位表示，见 H. Gould, J. Tobochnik 和 W. Christian 的电子版参考书 263 页 8.3 节。

## 1. 分子动力学：

对于氩气，在尺度  $L=10$  的二维方形区域里，有  $N=64$  个粒子，相互间作用服从 Lennard-Jones 势能。在方形网格安排粒子，设置初始速度使其温度  $T=1$ 。令  $\Delta t=0.01$ ，运行程序使之达到平衡。

- (1) 求平衡态温度。（注意保留计算时的初始状态，即粒子的位置和速度）
- (2) 求在平衡温度为 400 K 时粒子的速度分布。
- (3) 若分子间的相互作用改用刚性球模型模拟，计算平衡态时的分子平均自由程。

## 2. 分子动力学：

分子间的相互作用为 Lennard-Jones 模型。为方便起见，长度、速度、温度分别以  $\sigma$ 、 $(\varepsilon/m)^{1/2}$ 、 $\varepsilon/k_B$  为尺度测量。在边长为 6 的方形 2 维空腔中有 16 个氩粒子（氩： $\sigma=3.405\times 10^{-10}\text{ m}$ ， $m=39.95$ ， $\varepsilon/k_B=119.8\text{ K}$ ）。

- (1) 确定初始条件，使平衡时温度分别为 300 K 和 400 K。
- (2) 计算在上平衡温度时粒子的速度分布。
- (3) 确定 van der Waals 方程中

$$P = k_B T \frac{\rho}{1 - b\rho} - a\rho^2$$

的系数  $a$  和  $b$ 。