

7. vaja: molekulska dinamika

1. naloga

Napišite program, ki vam naredi molekulsko dinamiko za 1D, 2D ali 3D Lennard-Jonesove delce v NVE ansamblu. Poglejte, kako se energija, temperatura, tlak in porazdelitvena funkcija spreminja kot funkcija časa. Poglej še povprečne vrednosti kot funkcije tlaka in energije. Poglejte si porazdelitve hitrosti. Naredite še filmček gibanja delcev v sistemu.

D1. naloga

Napišite program, ki vam naredi molekulsko dinamiko za 1D, 2D ali 3D Lennard-Jonesove delce v NVT ansamblu. Temperaturo kontrolirajte tako, da reskalirate trenutno temperaturo. Naredite analizo kot pri 1. nalogi.

D2. naloga

Napišite program za preučitev energijske ploskve majhnega skupka Lennard-Jonesovih delcev (npr. 5 ali 10 delcev) v vakuumu. Poizkušajte določiti lokalni in globalni energetske minimum pri različnih temperaturah. Preučite dinamiko izhlapevanja s postopnim višanjem temperature. Analizirajte porazdelitev kinetične energije in stabilnost skupka delcev.