

6. vaja: Monte Carlo simulacija

1. naloga

N členkov dolga nitkasta molekula je obešena za oba konca. Vsak členek se lahko povesi od ničelne lege na poljubnega od 50 nivojev in si s tem zmanjša potencialno energijo za eno enoto na nivo. Če pa s tem prenategne vezi do sosedov, plača s prožnostno energijo, ki je za vsakega soseda enaka kvadratu razlike v nivojskem številu. Določi ravnovesno energijo v odvisnosti od temperature ter povprečen položaj členkov molekule.

2. naloga

Simulirajte katalitično reakcijo $A + B \rightarrow C$ na površini z uporabo kinetičnega Monte Carla. Izračunajte hitrost reakcije kot funkcijo temperature in pokritosti reaktantov na površini in kako so odvisne od parametrov modela.

D1. naloga

Napišite program, ki vam naredi Monte Carlo simulacijo za 1D, 2D in 3D Lennard-Jonesove delce. Poglejte, kako se energija in porazdelitvena funkcija spreminja kot funkcija temperature in gostote. Poglejte si tudi snapshot (slike) sistema ob različnih trenutkih.

D2. naloga

Uporabite Metropolisov algoritem Monte Carlo metode za vzorčenje gostote elektronov v preprostem 1D paraboličnem potencialu. Izračunajte pričakovano vrednost položaja in energije elektrona.