

شبیه سازی گاز آرگون – دینامیک مولکولی NVE

فرض کنید که برهمکنش میان اتم های گاز آرگون برهمکنش واندروالس است. با انتخاب دستگاه واحدهای کاهیده ی مناسب یک سیستم متشکل از ۱۰۰ اتم آرگون را شبیه سازی کنید. برای راحتی در نمایش رفتار گاز این سیستم را دوبعدی فرض کنید.

شرایط اولیه را برای سرعت ها تصادفی بگیرید و برای مکان ذرات آنها را به طور منظم در نیمه چپ جعبه بچینید.

الف) بقای انرژی سیستم را تحقیق کنید.

ب) نمودار تعداد ذرات موجود در نیمه چپ جعبه را برحسب زمان رسم کنید.

پ) رفتار دما و فشار گاز برحسب زمان را رسم کنید و مقدار تعادلی آنها را محاسبه کنید.

ت) تابع خود همبستگی سرعت ها را محاسبه کنید و زمان واهلش سیستم را بدست آورید.

ث) با تغییر انرژی سیستم گاز را در چند دمای مختلف شبیه سازی کنید و نشان دهید که از معادله گاز واندروالس

تبعیت میکند.

ج) با کاهش دما تغییر فازهای گاز را مشاهده کنید.