

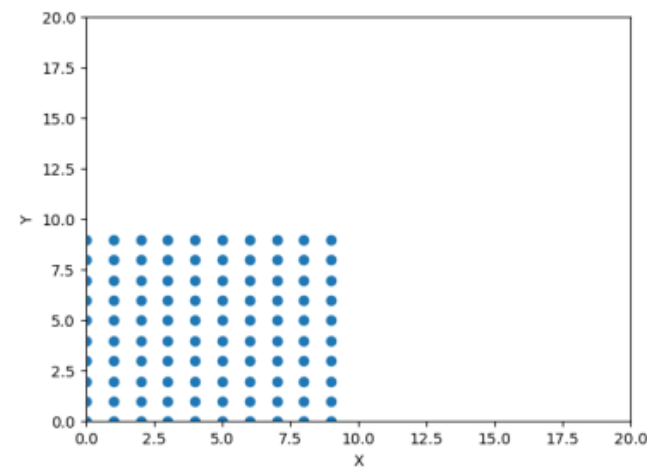
تمرین دینامیک مولکولی

برای انجام این تمرین مقادیر $m=1, \sigma=1, \varepsilon=1, k_B=1$ به عنوان مقادیر واحد های کاهیده در نظر گرفته شده است و در حالت NVE این کد را میزنیم.

برای ۱۰۰ ذره در جعبه ای به طول ۲۰ محاسبات انجام میشود.

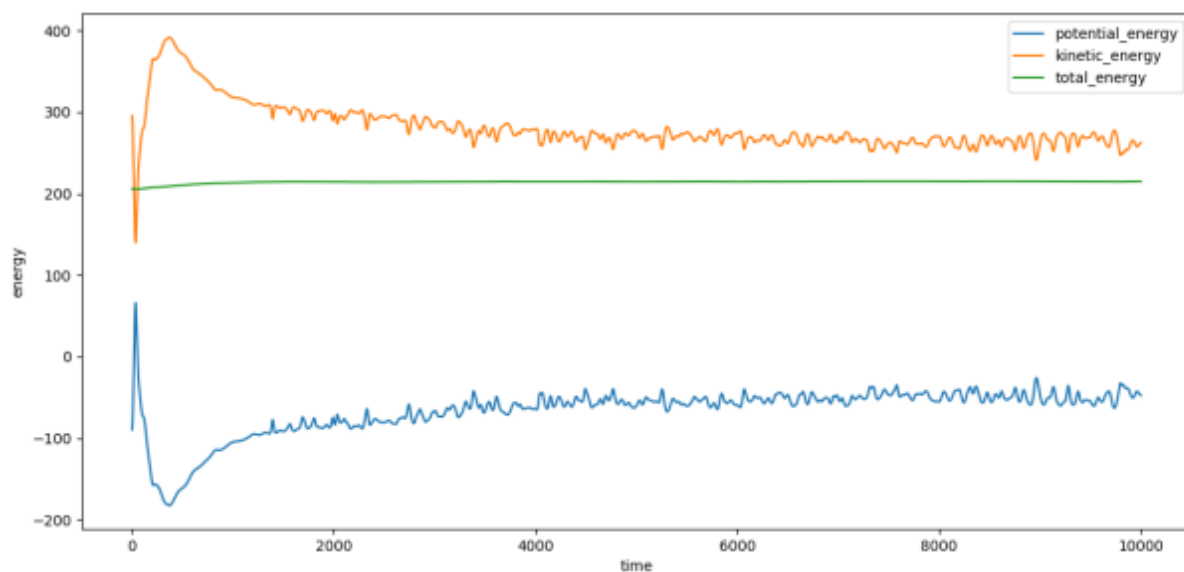
سرعت اولیه که نمایانگر دمای سیستم است را به صورت رندوم برابر 3 در واحد های کاهیده که برابر 30 برابر سرعت صوت است در نظر گرفته ایم.

و ذرات در یک گوشه جعبه قرار گرفته اند با فاصله ۱ سیگما از یکدیگر. مطابق شکل زیر .



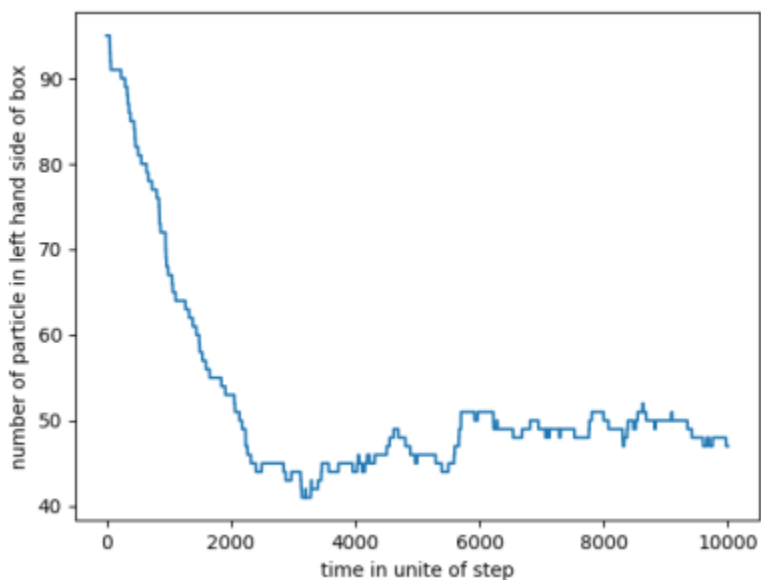
الف- بقا انرژی :

با جمع انرژی پتانسیل و جنبشی در هر استپ زمانی به شکل زیر رسیده ایم. که نشان دهنده پایستگی انرژی در طی زمان است.



ب- تعداد ذرات:

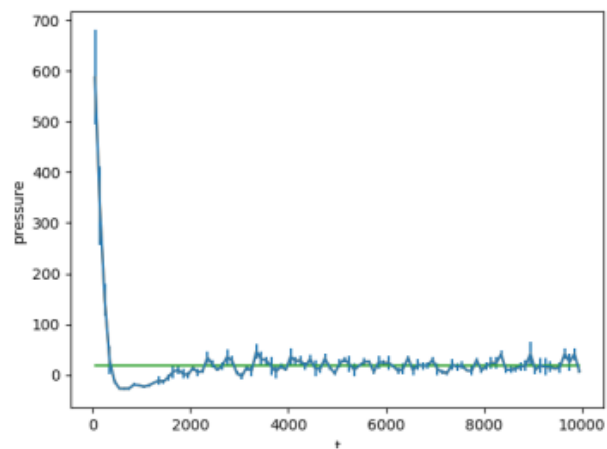
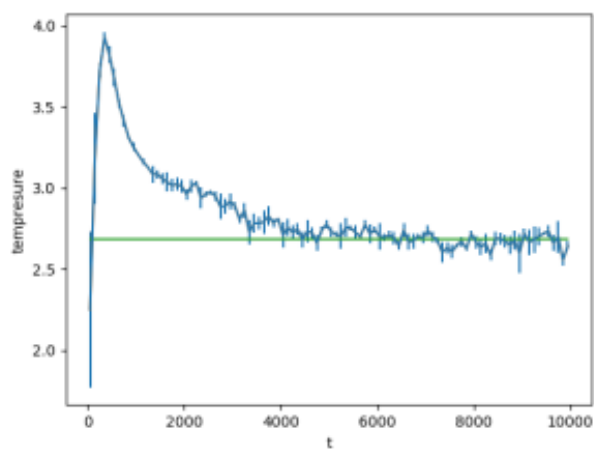
با توجه به نمودار زیر بعد از گذشت زمان تعداد ذرات سمت چپ به نصف مقدار اولیه میل میکند.



پ - برای محاسبه دما و فشار (بسط ویریل) از معادلات زیر استفاده شده است.

$$\frac{d(N-1)}{2} k_B T = 0.5 m \langle V^2 \rangle$$

$$p = \frac{N}{V} K_B T - \frac{N}{Vd} \sum_i \sum_{j<i} F_{ij} \cdot r_{ij}$$



فشار تعادلی برابر 20 واحد کاهیده و دمای تعادلی برابر 2.7 واحد کاهیده شده است.

که در دستگاه SI این دما برابر حدود 310 کلوین میباشد.