

Molekylær Dynamikk

Oblig 3

Øyvind Sigmundson Schøyen

Kandidatnummer: 30

Avsluttande prosjekt i FYS3150



FYS3150 Computational Physics

Universitetet i Oslo

1. desember 2014

Samandrag

I dette prosjektet har me tatt for oss modellering av argon på atomært nivå. Me har vore interesserte i å lage eit program som skal lage ein atomstruktur etter eige ynskje. I tillegg har me ville sjå på korleis eit slikt system utvikler seg over tid og måle statistiske eigenskapar ved det. For å modellere eit så realistisk resultat innanfor det som er mogleg å køyre på ein pc har me utnytta celledister for å auke hastigheita på programmet. For krafta har me nytta Lennard Jones potensialet og som integrator har me brukt Velocity Verlet-algoritma. Programma våre er objektorientert C++-kode med eit Python rammeverk som skal enklast mogleg køyre programmet vårt for forskjellige parametrar og plote verdiar. Me nyttar VMD for å visualisere atoma i rommet. All kjeldekode ligg på github.

Rett litt på denne...

<https://github.com/Schoyen/molecular-dynamics-fys3150>

Innhald

Introduksjon

3

Introduksjon