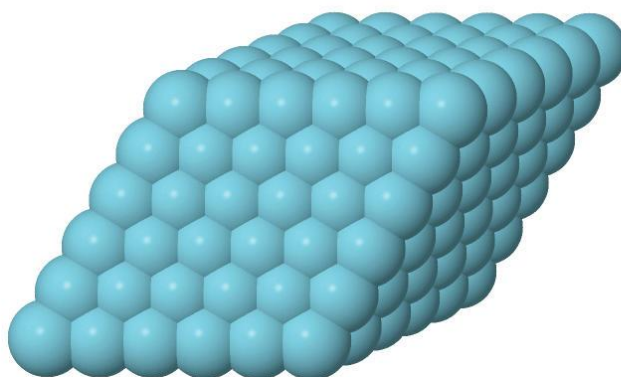


Raport

1 CEL ĆWICZENIA

Celem laboratorium jest napisanie programy symulującego dynamikę molekularną atomów argonu. Argon jest gazem szlachetnym, co oznacza, że oddziałuje z innymi atomami jedynie przez siły van der Waalsa. Aby zapewnić odpowiednie ciśnienie dla gazowej fazy został dodany potencjał działający w kierunku centralnym po przekroczeniu przez atom odpowiedniej odległości od środka układu. Do odpowiedniej analizy programu należało przeprowadzić symulację dla różnych temperatur początkowych. Dodatkowo wielkość próbki to 6x6x6 atomów. Dla uzyskania minimalnych naprężeń układ romboidalnym o maksymalnym uporządkowaniu. Symulacje zostały przeprowadzone z krokiem czasowym $2 \cdot 10^{-3}$ ps natomiast cała symulacja dla wysokich temperatur zajmuje 200ps.

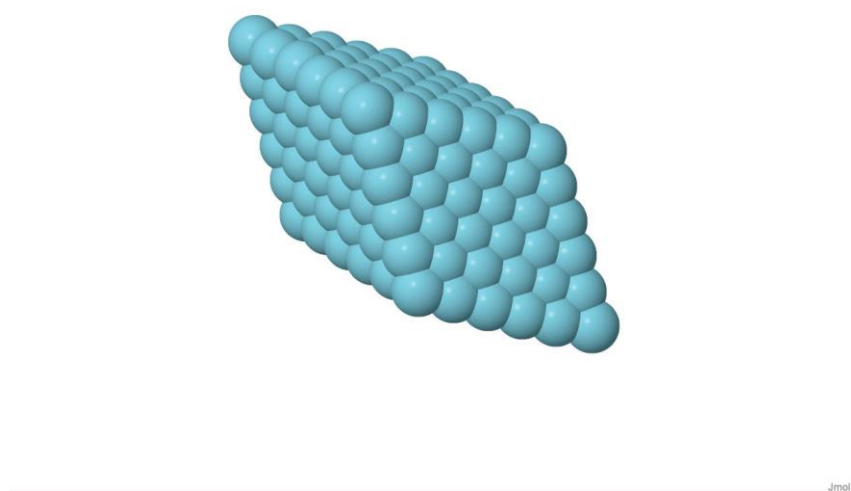


Jmol

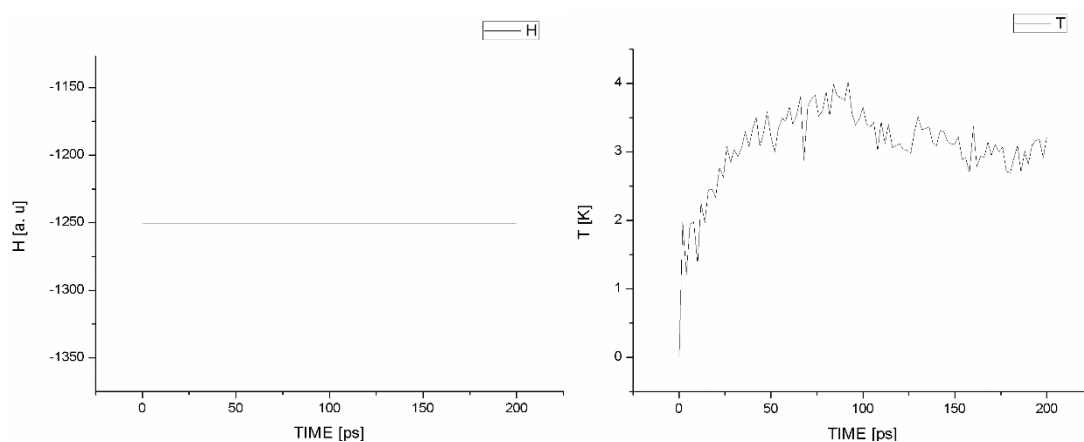
Rys. 1. Położenia początkowe atomów w superkomórce. Sfery symbolizują atomy argonu.

2 TEMPERATURA OK

Dla tej temperatury kryształ powinien zachować ułożenie romboidalne, ponieważ temperatura krystalizacji argonu wynosi 84K. W początkowej fazie układ bardzo szybko dąży do średniej temperatury około 4K i oscyluje między 3K a 6K. Oscylacje te są spowodowane skończonymi wymiarami próbki gdyż największe oscylacje przypadają na pierwszy i ostatni atom mające najmniej sąsiadów.



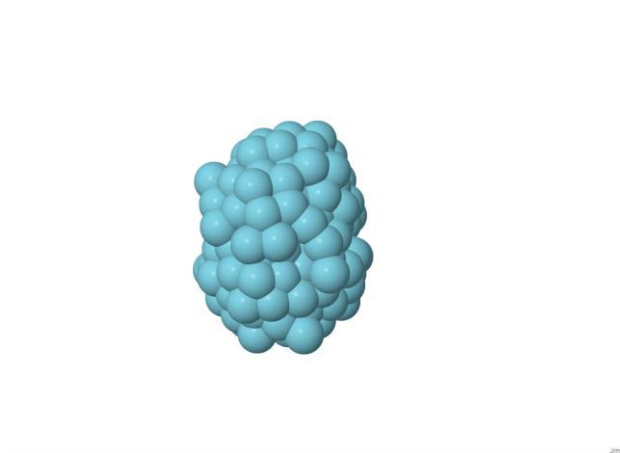
Rys. 2. Ostatnia klatka symulacji.



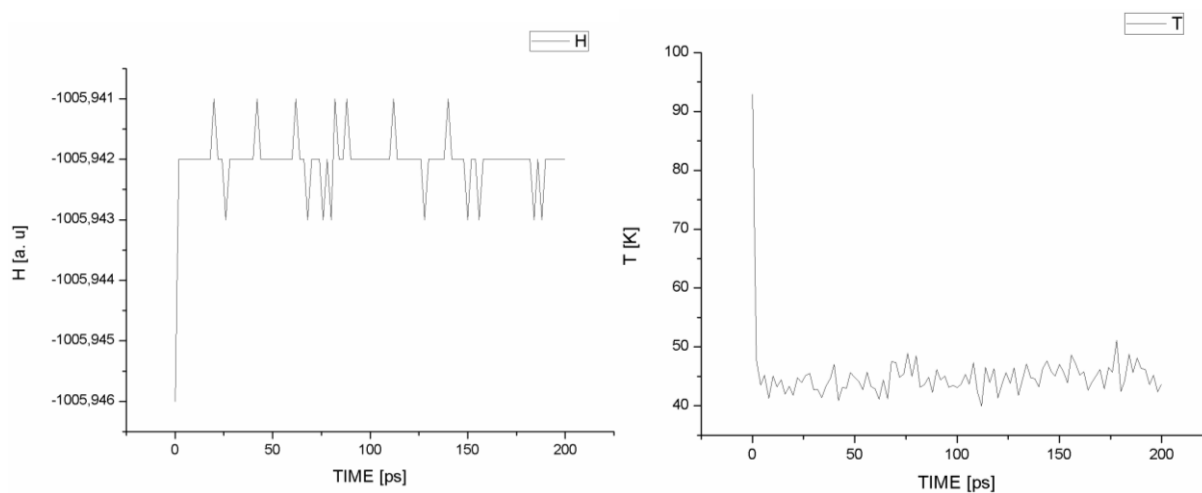
Rys. 3. Wykresy od lewej energii całkowitej od czasu oraz temperatury w czasie symulacji.

3 TEMPERATURA 100K

Kryształ przekracza temperaturę topnienia materiału, co powoduje w bardzo szybkim czasie przemieszczenie zewnętrznych atomów, do środka układu a następnie formowanie kropli. Temperatura po termolizie ustala się w okolicy 50K.



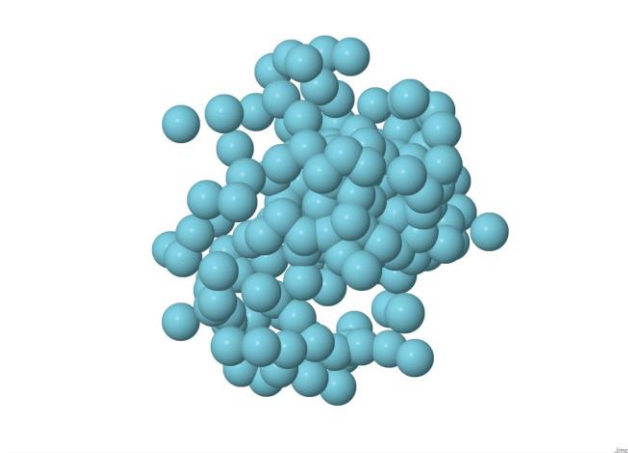
Rys. 4. Ostatnia klatka symulacji.



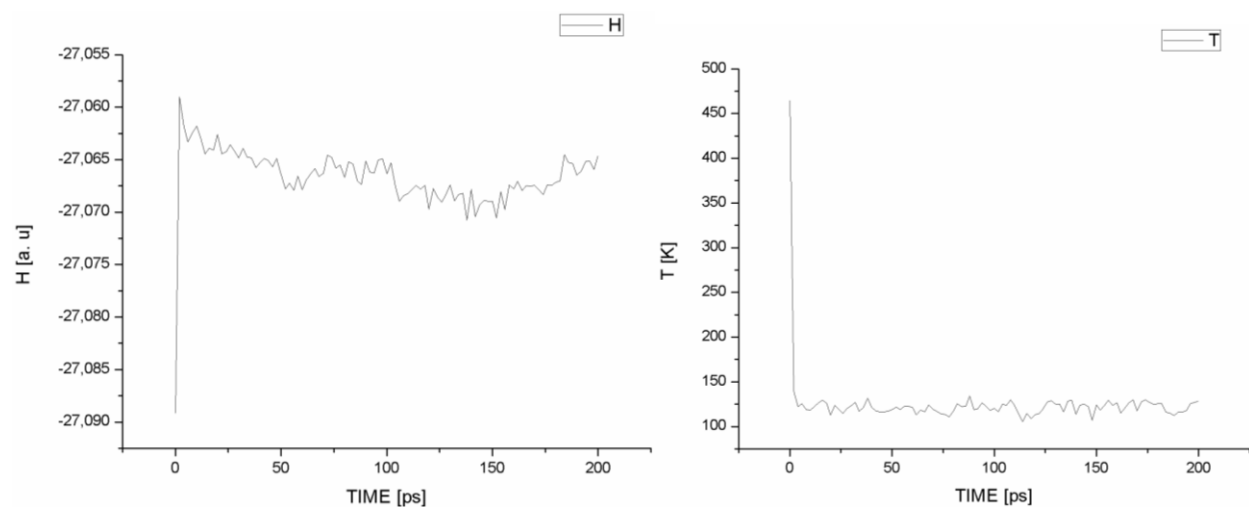
Rys. 5. Wykresy od lewej energii całkowitej od czasu oraz temperatury w czasie symulacji.

4 TEMPERATURA 500K

Po krótkim czasie symulacji temperatura utrzymuje się w okolicach 130K co powoduje prawdopodobnie formy ciekłej wewnątrz naczynia oraz wolnych, gazowych atomów no granicy potencjału.



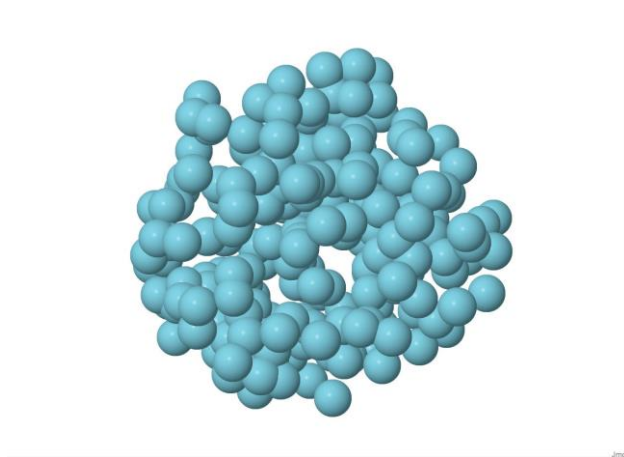
Rys. 6. Ostatnia klatka symulacji.



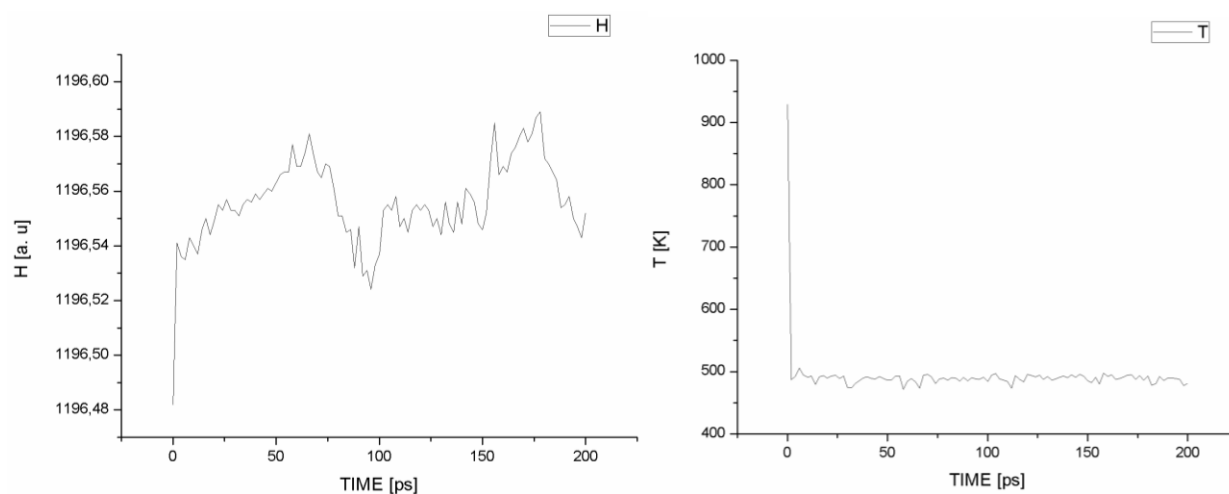
Rys. 7. Wykresy od lewej energii całkowitej od czasu oraz temperatury w czasie symulacji.

5 TEMPERATURA 1000K

Wszystkie atomy są już w fazie gazowej co powoduje że temperatura układu po termolizie utrzymuje się o okolicy 500K.



Rys. 8. Ostatnia klatka symulacji.



Rys. 9. Wykresy od lewej energii całkowitej od czasu oraz temperatury w czasie symulacji.