

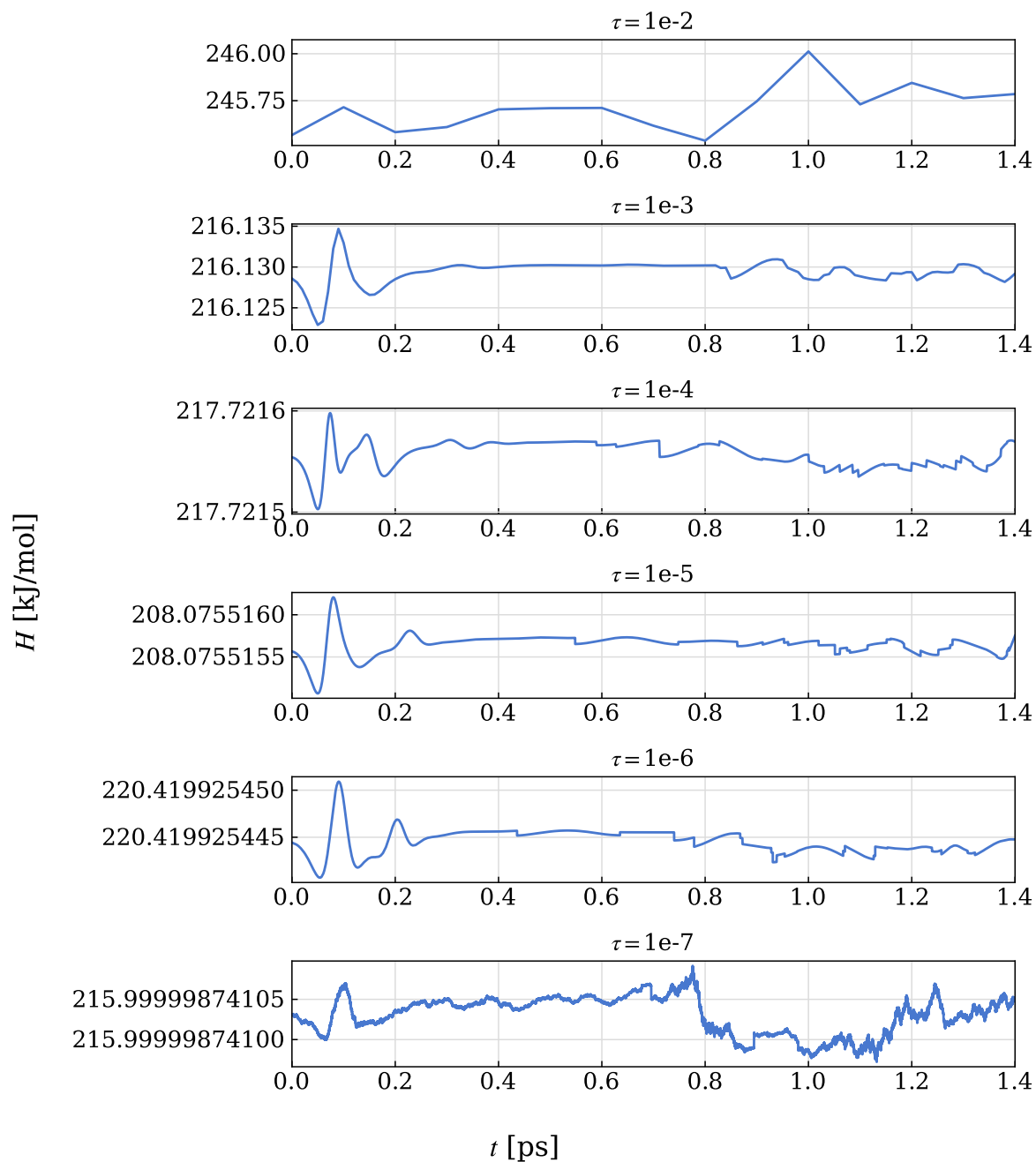
# MD - Symulacja Argonu

Dawid Karpiński

23.11.2023 r.

# 1 Test stabilności programu

Rysunek 1: Zachowanie symulacji przy różnych krokach czasowych  $\tau$

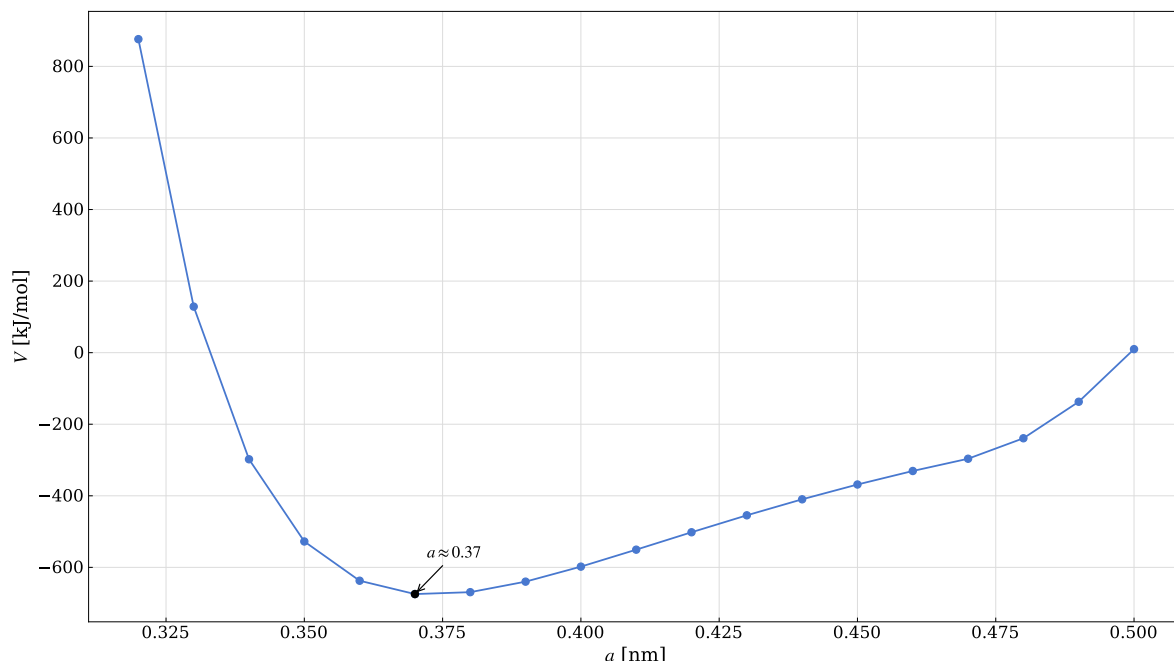


Dla zbadanych wartości  $\tau$ , symulacja wydaje się być stabilna. Przy  $\tau = 10^{-7}$ , zaczynają być widoczne większe fluktuacje w energii. Długi czas wykonywania programu dla mniejszych wartości  $\tau$  uniemożliwił dostateczne znalezienie granicy stabilności.

## 2 Kryształ

Najniższą energię potencjalną otrzymano dla wartości  $a \approx 0.37$  [nm].

Rysunek 2: Zależność energii potencjalnej  $V$  od wartości  $a$

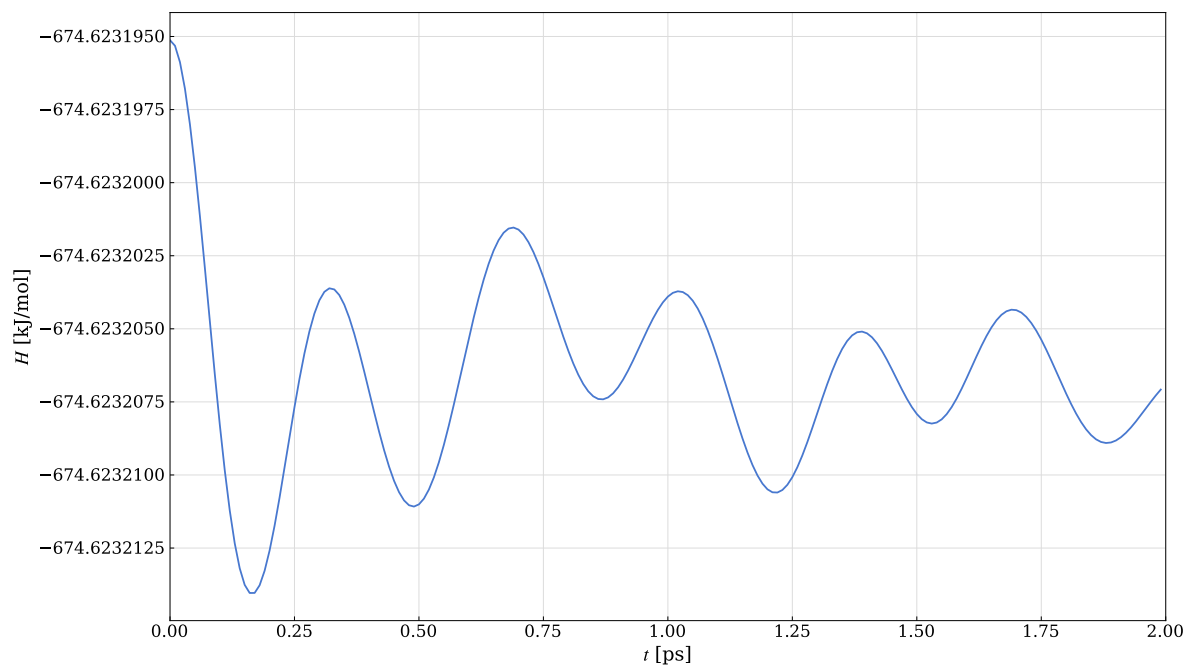


Średnia temperatura po czasie 1 [ps] wyniosła:  $T_{\text{avg}} \approx 0.6925$  [K]  $> 0$  [K]. Dzieje się tak, ze względu na ograniczenia numeryczne liczb zmiennych przecinkowych w pamięci komputera. Według mechaniki kwantowej, najmniejsza energia jest zwykle większa od zera, dlatego kryształ może ustalić się na temperaturze większej niż 0 [K] (przez tzw. drgania zerowe).

W praktyce natomiast, jest to wynik ograniczeń numerycznych pamięci komputera i aproksymacji użytych w symulacji. Nie jest zatem możliwe dokładne odwzorowanie stanu o zerowej energii kinetycznej. Układ więc ustala się na niskiej, ale niezerowej temperaturze.

Warto zauważyć, że temperatura 0K, znana jako zero bezwzględne, jest teoretyczną granicą, do której można ochłodzić układ termodynamiczny<sup>1</sup>. W rzeczywistości, osiągnięcie temperatury 0K jest niemożliwe z powodu trzeciej zasady termodynamiki<sup>1</sup>.

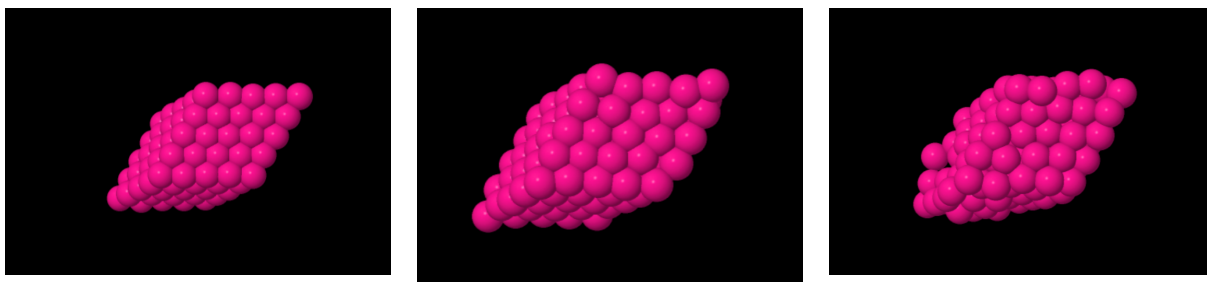
Rysunek 3: Zależność hamiltonianu  $H$  od czasu  $t$  kryształu o znalezionej stałej sieci



Wartość hamiltonianu zmienia się dopiero na czwartym miejscu po przecinku, co świadczy o niewielkiej fluktuacji.

## 2.1 Topnienie kryształu

Rysunek 4: Zachowanie kryształu w:  $T = 10$  [K],  $T = 70$  [K],  $T = 130$  [K]



Temperaturę topnienia oszacowano na około  $T = 70$  [K], ponieważ struktura regularna kryształu zaczyna się widocznie załamywać w granicach 60 - 80 [K].

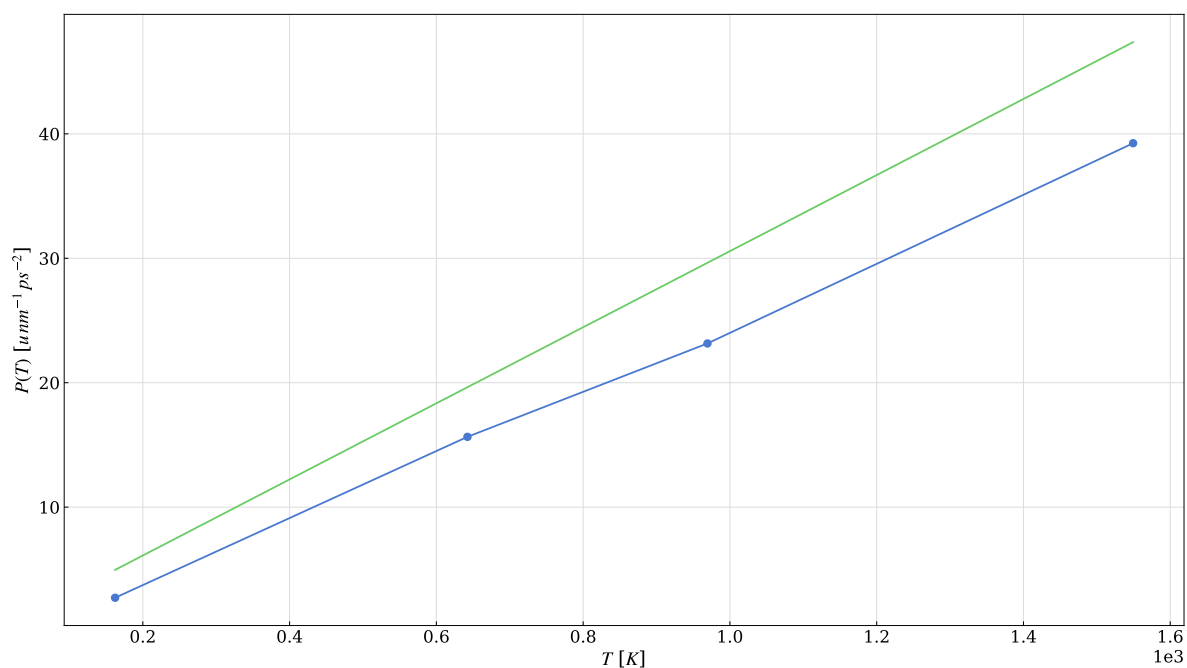
## 3 Gaz

### 3.1 Porównanie z gazem doskonałym

Na koniec, porównano zależność ciśnienia od temperatury z danych symulacji do zależności teoretycznej:

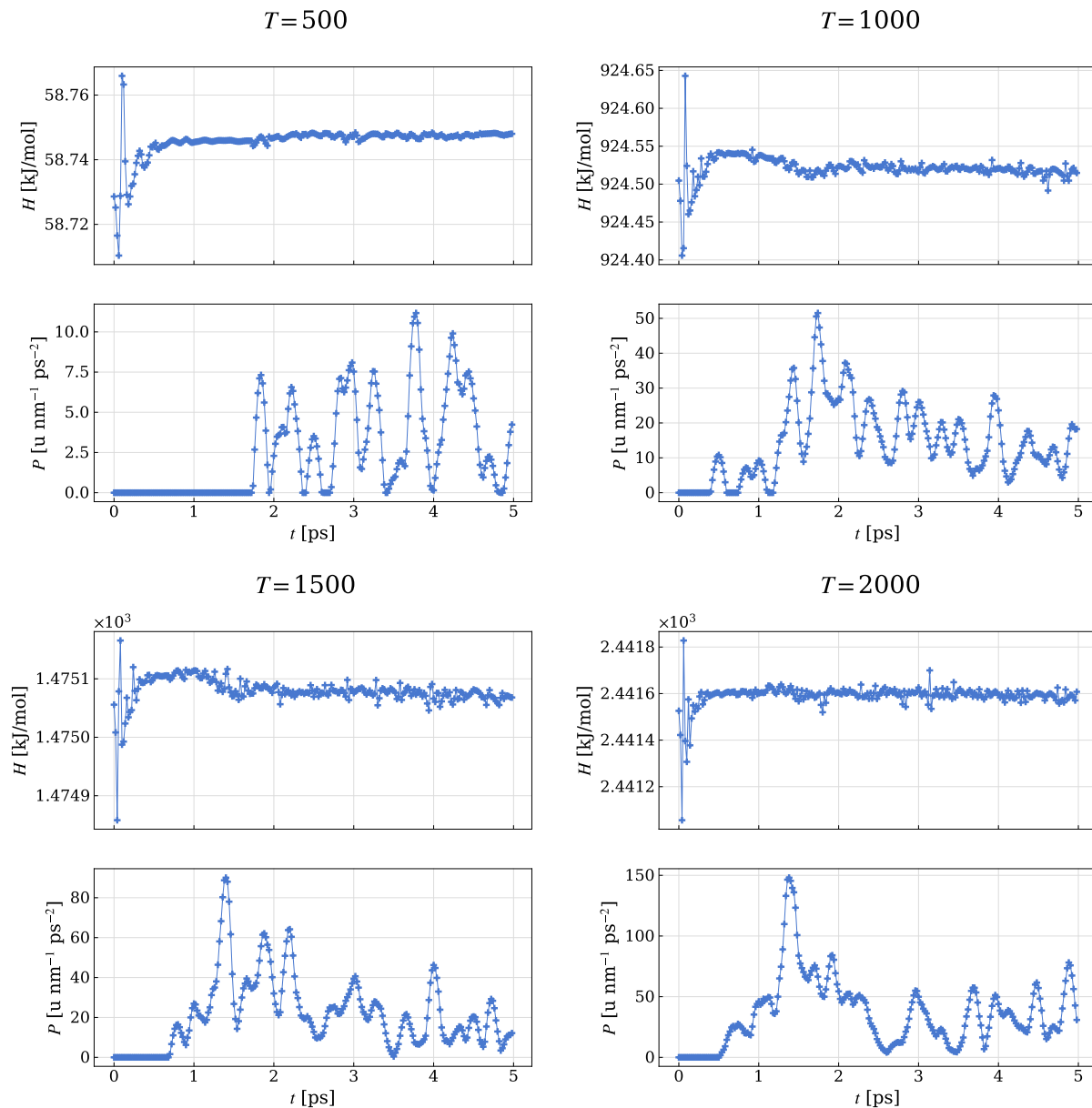
$$P(T) = \frac{3}{2} \frac{N k_B T}{V}$$

Rysunek 5: Porównanie zależności  $P(T)$  dla danych pomiarowych i gazu doskonałego



Na koniec przedstawiono wykresy: Hamiltonian od czasu i ciśnienie od czasu dla każdego z powyższych punktów:

Rysunek 6: Zestawienie zależności  $H(T)$  i  $P(T)$  dla badanych czterech punktów



## 4 Podsumowanie

Kod programu oraz wszelkich skryptów do zbierania i analizy danych znajduje się w repozytorium: <https://github.com/davkk/argon-simulation>.

Do wykonania zadania wykorzystałem takie technologie i narzędzia jak: Python (Numba), Bash (GNU Parallel, awk, itd.), Jmol.