

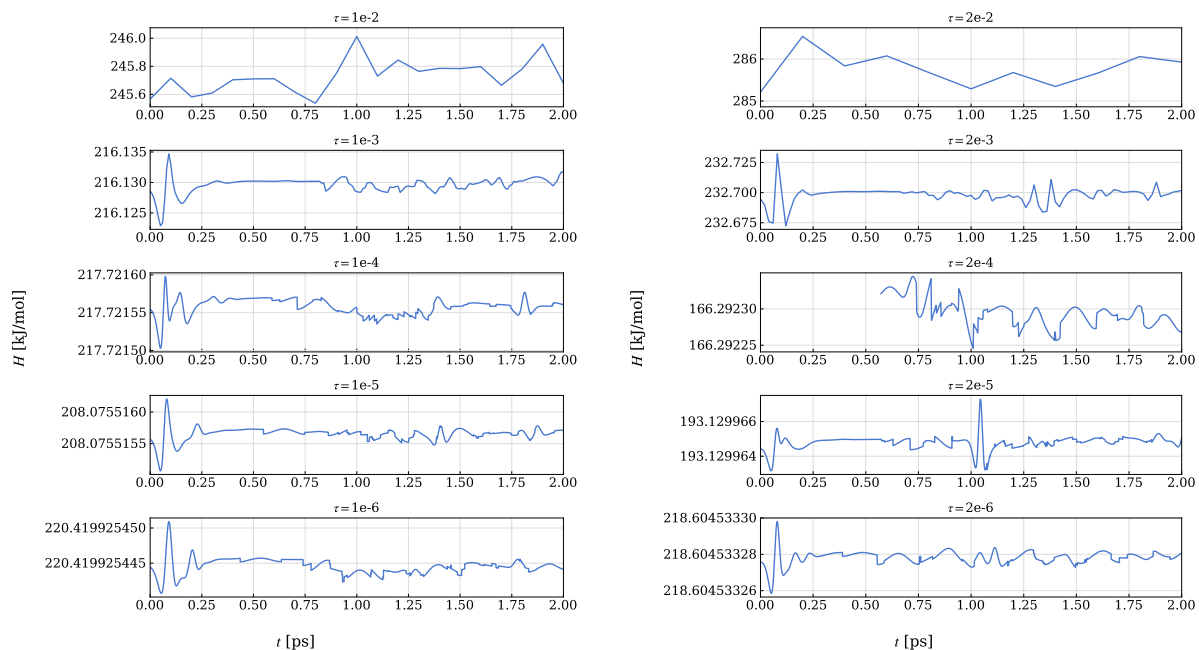
MD - Symulacja Argonu

Dawid Karpiński

23.11.2023 r.

1 Test stabilności programu

Rysunek 1: Zachowanie symulacji przy różnych krokach czasowych τ

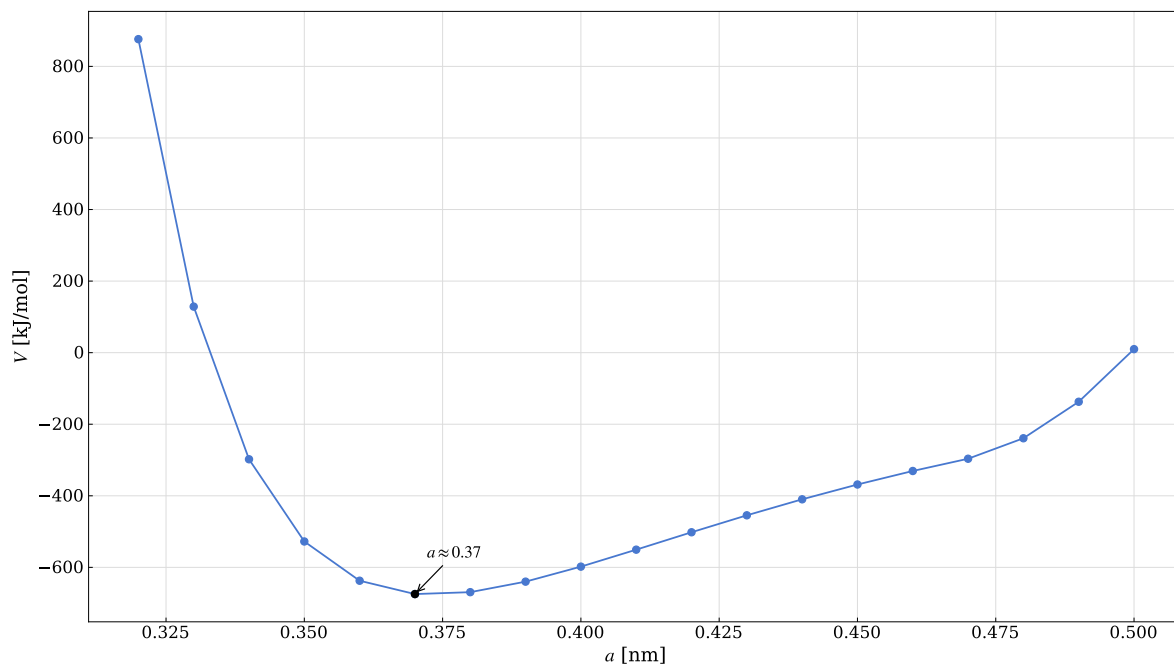


Dla niektórych zbadanych wartości τ , symulacja wydaje się być stabilna. Natomiast, m. in. $\tau = 2 \cdot 10^{-2}$ lub $\tau = 2 \cdot 10^{-4}$ wyróżniają się większymi fluktuacjami wartości energii, co może przełożyć się na dokładność wyników symulacji.

2 Kryształ

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

Rysunek 2: Zależność energii potencjalnej V od wartości a



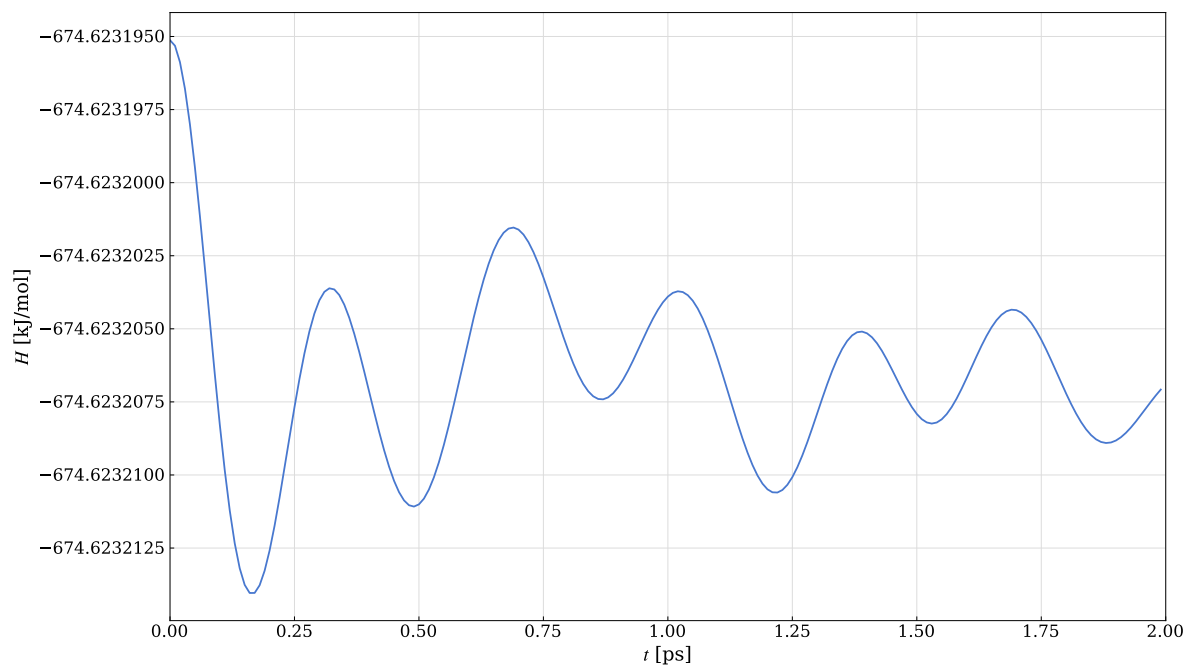
Średnia temperatura po czasie 1 [ps] wyniosła: $T_{\text{avg}} \approx 0.6925$ [K] > 0 [K].

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 0 [K], znana jako zero bezwzględne, jest teoretyczną granicą, do której można ochłodzić układ termodynamiczny. W rzeczywistości, osiągnięcie temperatury 0 [K] jest niemożliwe z powodu trzeciej zasady termodynamiki.

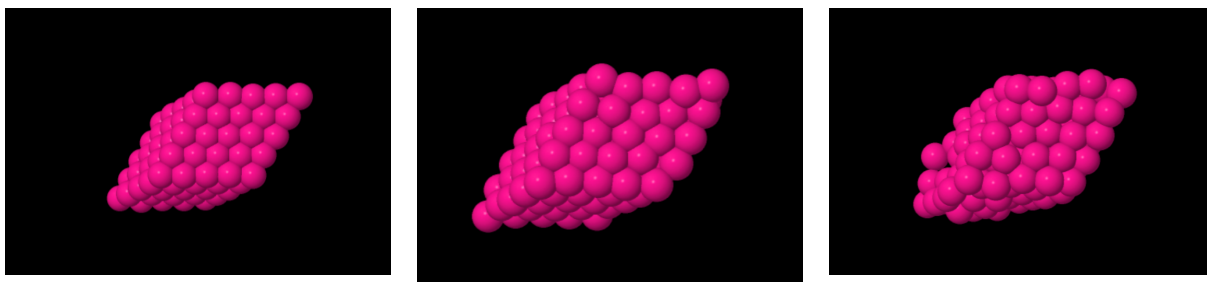
Rysunek 3: Zależność hamiltonianu H od czasu t kryształu o znalezionej stałej sieci



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].

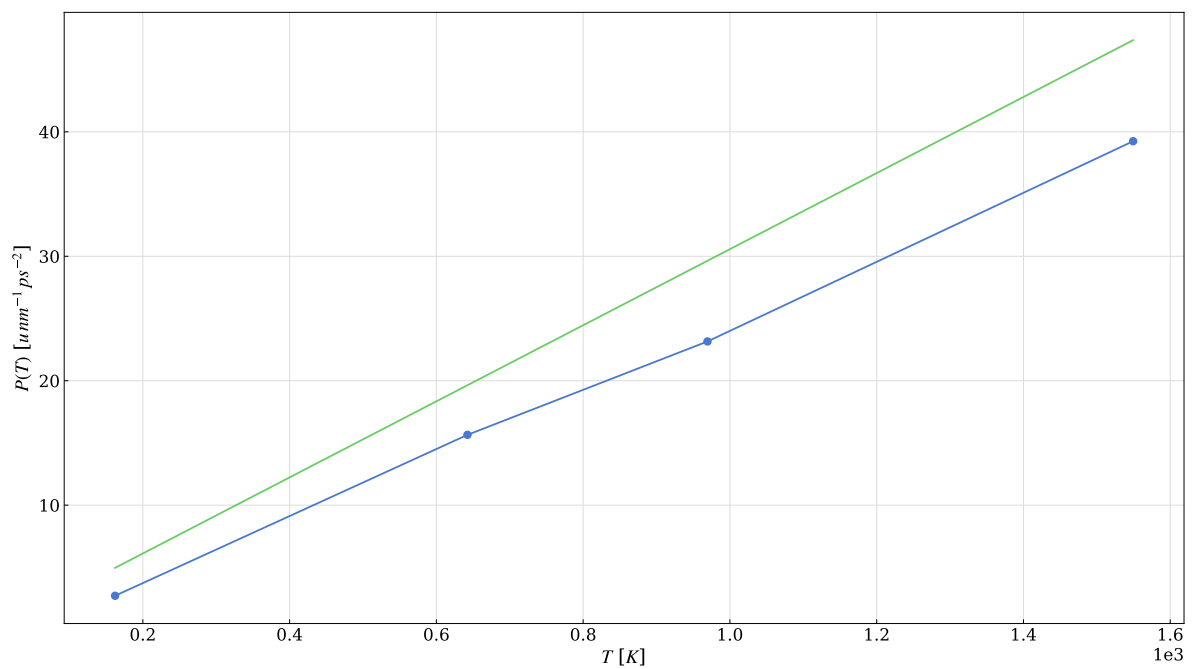
3 Gaz

3.1 Porównanie z gazem doskonałym

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

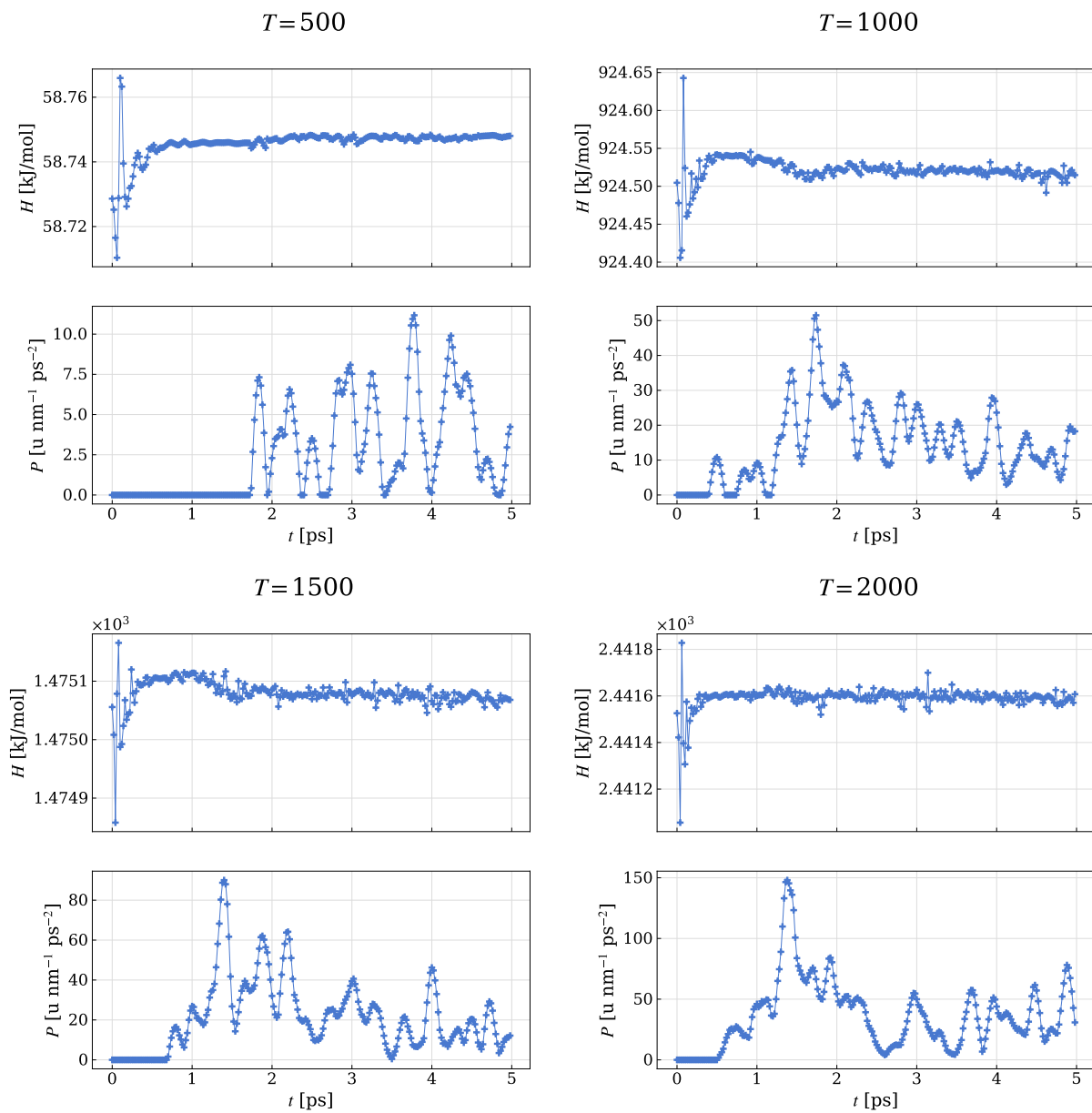
$$P(T) = \frac{3}{2} \frac{N k_B T}{V}$$

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 wszelkie skrypty do zbierania i analizy danych znajdują się w repozytorium: <https://github.com/davkk/argon-simulation>.

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