

## تمرین سری دهم شبیه‌سازی مولکولی

برهم‌کنش میان اتم‌های گاز آرگون را به صورت Lennard Jones در نظر بگیرید. و یک سیستم متشکل از ۱۰۰ اتم آرگون را در فضا دوبعدی (آنسامبل میکروکانونیک) برای چند انرژی مختلف شبیه‌سازی کنید. شرایط اولیه:

position به صورت کریستالی در سمت چپ سیستم قرار گرفته باشد.

velocity تصادفی.

خواسته‌ها:

۰ یک *trajectory* از سیستم.

۱ نمودار تعداد ذرات در سمت چپ جعبه (معیاری از تعادل)

۲ تحقیق بقا انرژی در این سیستم.

۳ تابع خودهمبستگی سرعت‌ها و محاسبه زمان تعادل سیستم.

۴ محاسبه دما و فشار سیستم در هر انرژی (پس از رسیدن به حالت تعادل) برای بدست آوردن دما از انرژی جنبشی ذرات و برای فشار از رابطه ویریال می‌توانید استفاده کنید.

۵ تحقیق رابطه گاز واندروالس و بدست آوردن ثابت‌های  $a$  و  $b$ . با تبدیل واحدهای کاهیده و مقایسه آن با مقادیر واقعی، خطا نسبی را محاسبه کنید.

۶ کاهش دما (به وسیله *scale* کردن سرعت‌ها در هر چند قدم) تغییر فاز سیستم را مشاهده کنید. (برای این قسمت *trajerctory* نیز بهتر است بفرستید.)