

گزارش کار تمرین شماره ۱۱

ارمیا اعتمادی بروجنی

مقدمه

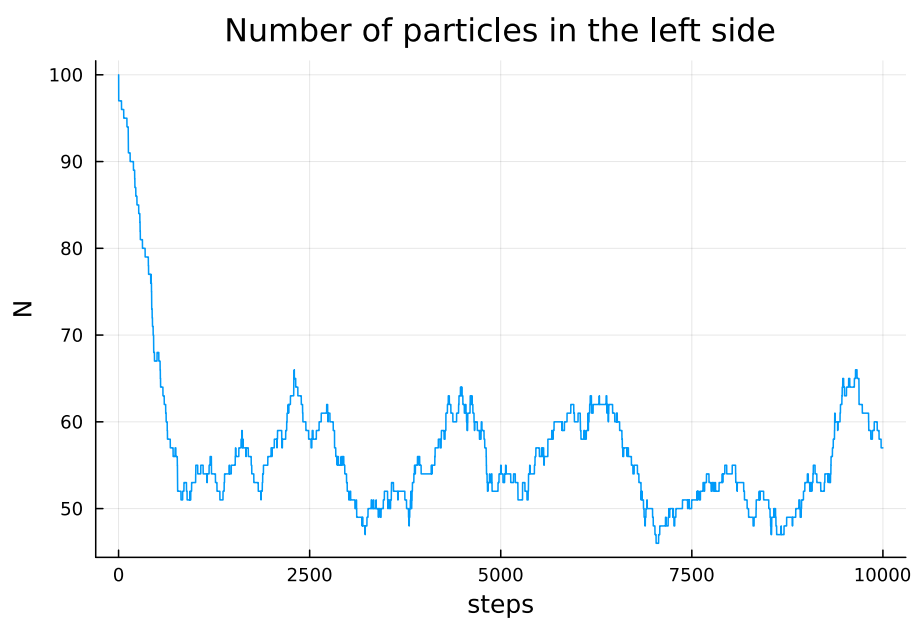
در این سری تمرین گاز آرگون را به کمک دینامیک ملکولی شبیه سازی می کنیم. این سری تمرین با زبان زیبا و کاربردی Julia، نوشته شده است.

نظریه و شبیه سازی

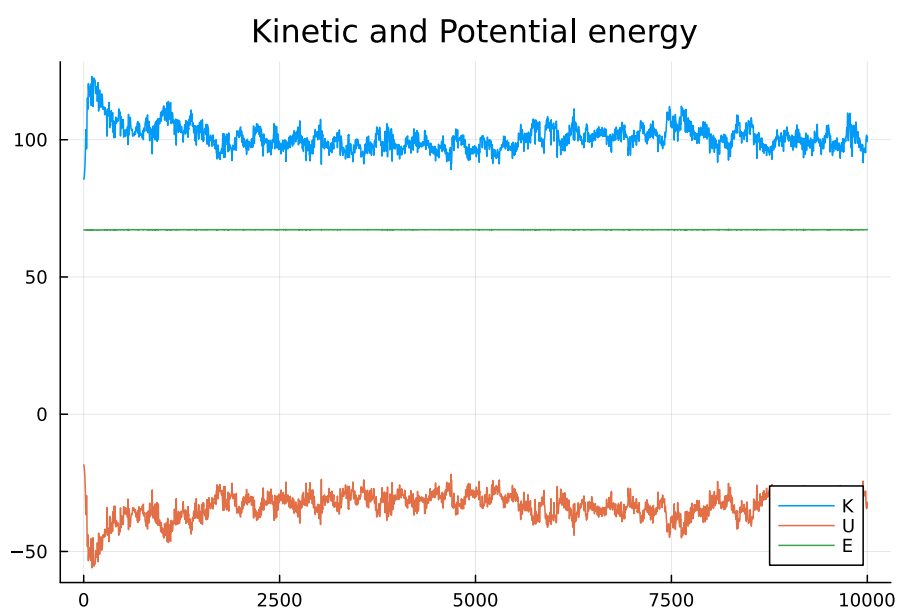
مسئله، شبیه سازی ذرات با پتانسیل لئارد-جونز است. شرایط مرزی تناوبی هستند و نیروها تنها در شعاع $\text{cutoff} = 5$ مشخص عمل می کنند. برای شبیه سازی حرکت ذرات از روش ورله سرعتی استفاده شده که انرژی را به خوبی پایسته نگاه می دارد و در مکان ذرات نیز دقت مناسبی دارد. در لحظه شروع، ذرات دارای مکان با فاصله یکسان در یک طرف جعبه و سرعت تصادفی با احتمال یکنواخت هستند. ابعاد جعبه در طول کاهیده ۳۰ در ۳۰ و تعداد ذرات ۱۰۰ عدد است.

نتایج

هر شبیه سازی با طول قدم زمانی $h = 0.01$ و تعداد قدم $steps = 10000$ اجرا شده است. برای سرعت اولیه بیشینه های متفاوت، انیمیشن های مسیر ذرات رسم شده اند که در فولدر `anim` موجود هستند. در ادامه برخی از نتایج برای $v_{max} = 3.0$ به نمایش گذاشته شده اند.



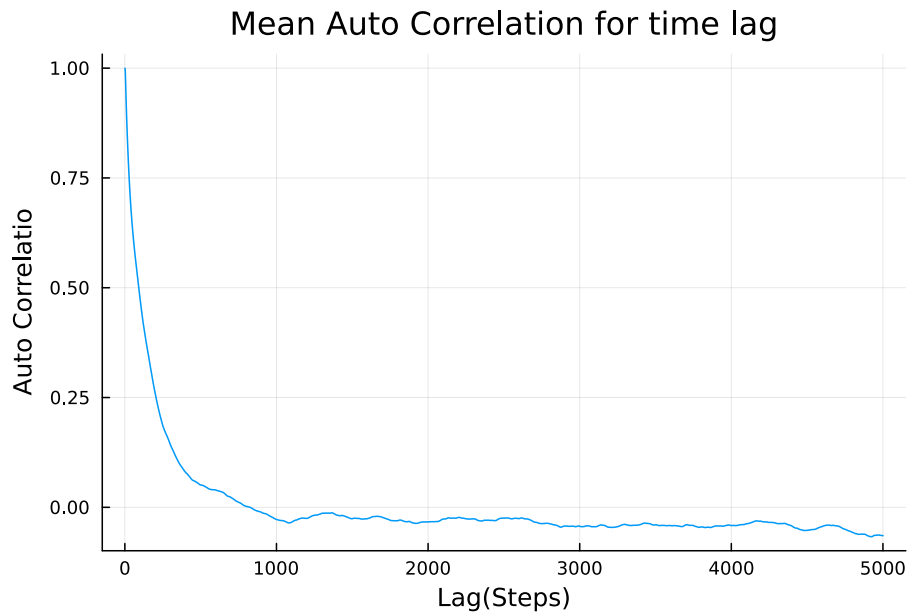
شکل ۱: تعداد ذرات در سمت چپ جعبه



شکل ۲: انرژی جنبشی و پتانسیل و پایستگی انرژی کل

در ادامه برای بررسی شبیه سازی، خودهمبستگی اندازه سرعت ها بر حسب زمان را بررسی کرده ایم. با توجه به

تعداد ذرات، این مقدار میانگین گرفته شده است.



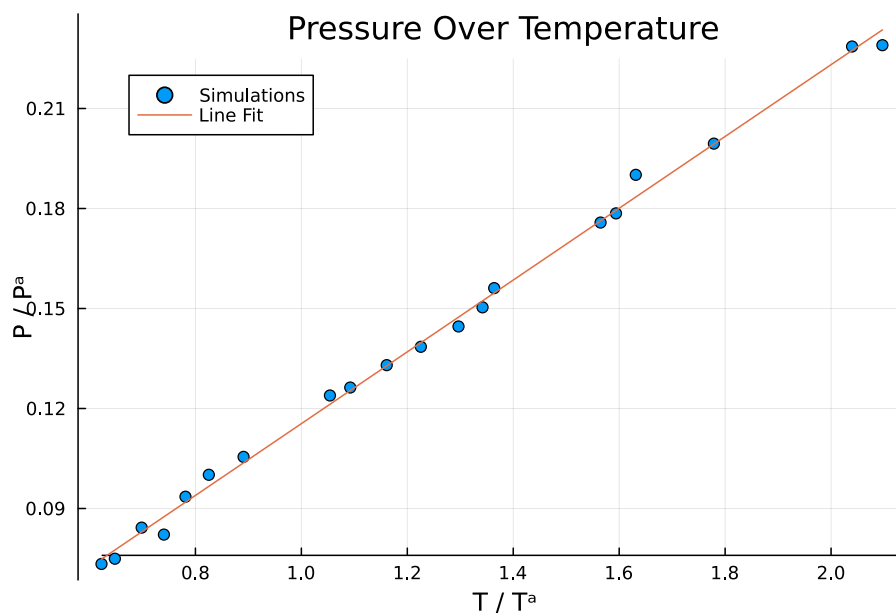
شکل ۳: خودهمبستگی

معادله واندر والس

معادله واندر والس در واحدهای کاهیده به صورت زیر است:

$$P = \frac{1}{V/N - b} T - \frac{N^2}{V^2} a \quad (1)$$

با شبیه سازی برای سرعت اولیه های متفاوت می توانیم خط زیر را به دست بیاوریم:



شکل ۴: نمودار فشار بر حسب دما

ثوابت خط برازش شده به صورت زیر است:

$$P = \theta_1 + \theta_2 T \quad (۲)$$

$$\theta_2 = 0.113 \pm 0.001 \quad (۳)$$

$$\theta_1 = -0.003 \pm 0.002 \quad (۴)$$

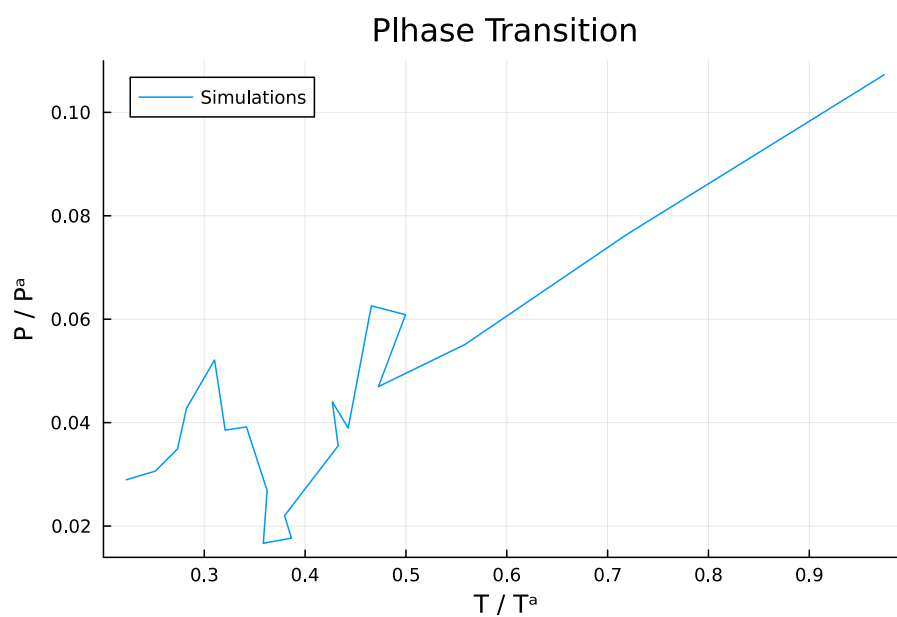
با مقایسه با معادله واندروالس به ثوابت زیر می‌رسیم:

$$b = 0.15 \pm 0.07 \quad (۵)$$

$$a = 0.02 \pm 0.02 \quad (۶)$$

گذار فاز

با کاهش متوالی سرعت در قدم های متفاوت تلاش شده گذار فاز مشاهده شود. نمودار نتیجه به صورت زیر است:



شکل ۵: نمودار فشار بر حسب دما برای گاز در حال گذار فاز

به نظر می‌رسد پیش از دمای مشخصی روش ما برای محاسبه فشار به اندازه کافی دقیق نیست و نتایج عجیبی می‌دهد که می‌تواند ناشی از ورود به فاز مایع باشد. انیمیشن این گذار فاز نیز موجود است. توجه داشته باشید که سرعت این انیمیشن به علت زمان طولانی ۱۰۰ برابر بقیه انیمیشن‌ها است.