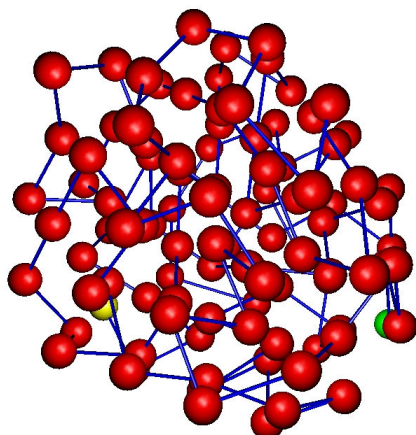
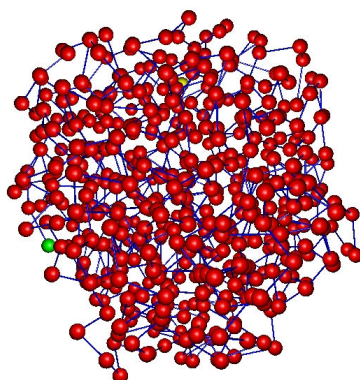


Rysunek 1. Rozkład normalny N(0,1). Gęstość prawdopodobieństwa została wyznaczona dla 10^7 liczb losowych rozłożonych w 4096 podprzedziałach, wygenerowanych przy użyciu generatora liczb losowych stworzonego przez Marsaglię [17]. Krzywa Gaussa dopasowana do danych, z dobrym przybliżeniem odpowiada rozkładowi normalnemu N(0,1) (27).

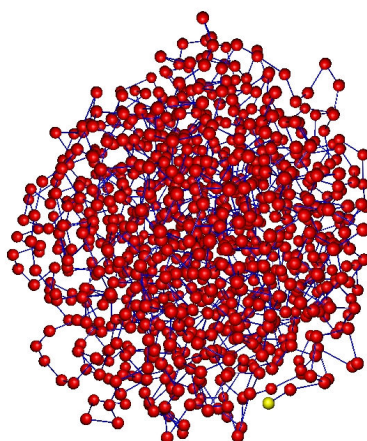
Stan podstawowy układu 100, 500 i 1000 atomów



$R=2.75$



$R=4.80$

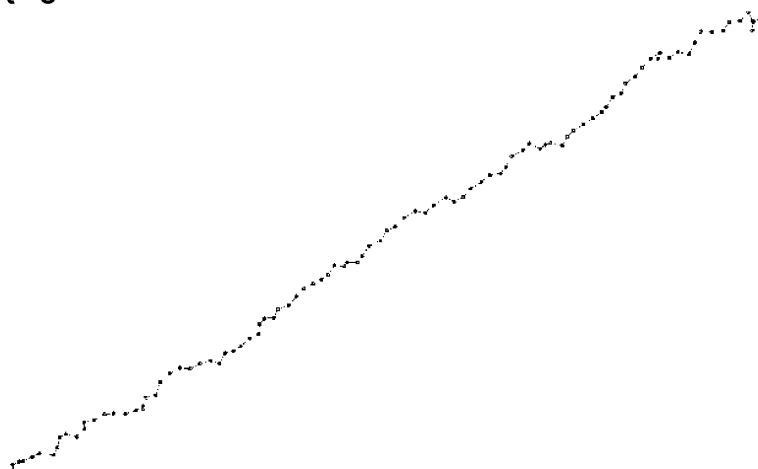


$R=8.15$

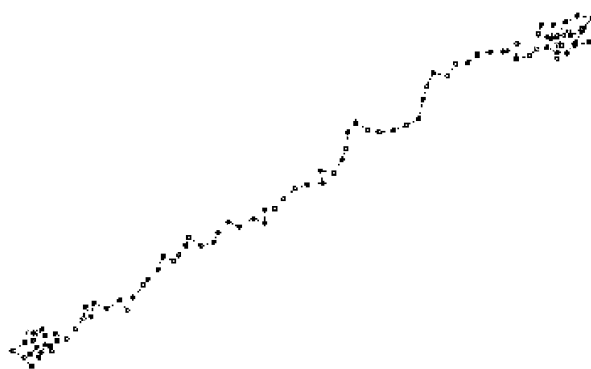
Rysunek 2. Stan podstawowy polimeru Lennarda-Jonesa. Powyższe rysunki przedstawiają stan podstawowy polimerów złożonych ze 100, 500 i 1000 atomów w temperaturze $T=0$. Układ znajduje się wewnątrz sfery o promieniu R , wyznaczonym przy pomocy zależności (35). Stan podstawowy tworzy się w niskich temperaturach jako efekt oddziaływania daleko zasięgowego reprezentowanego przez potencjał Lennarda-Jonesa.

Schemat procesu zwijania się łańcucha 100 atomów

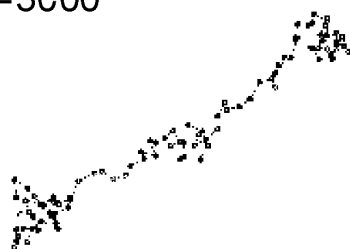
a) $t=0$



b) $t=800$



c) $t=3000$



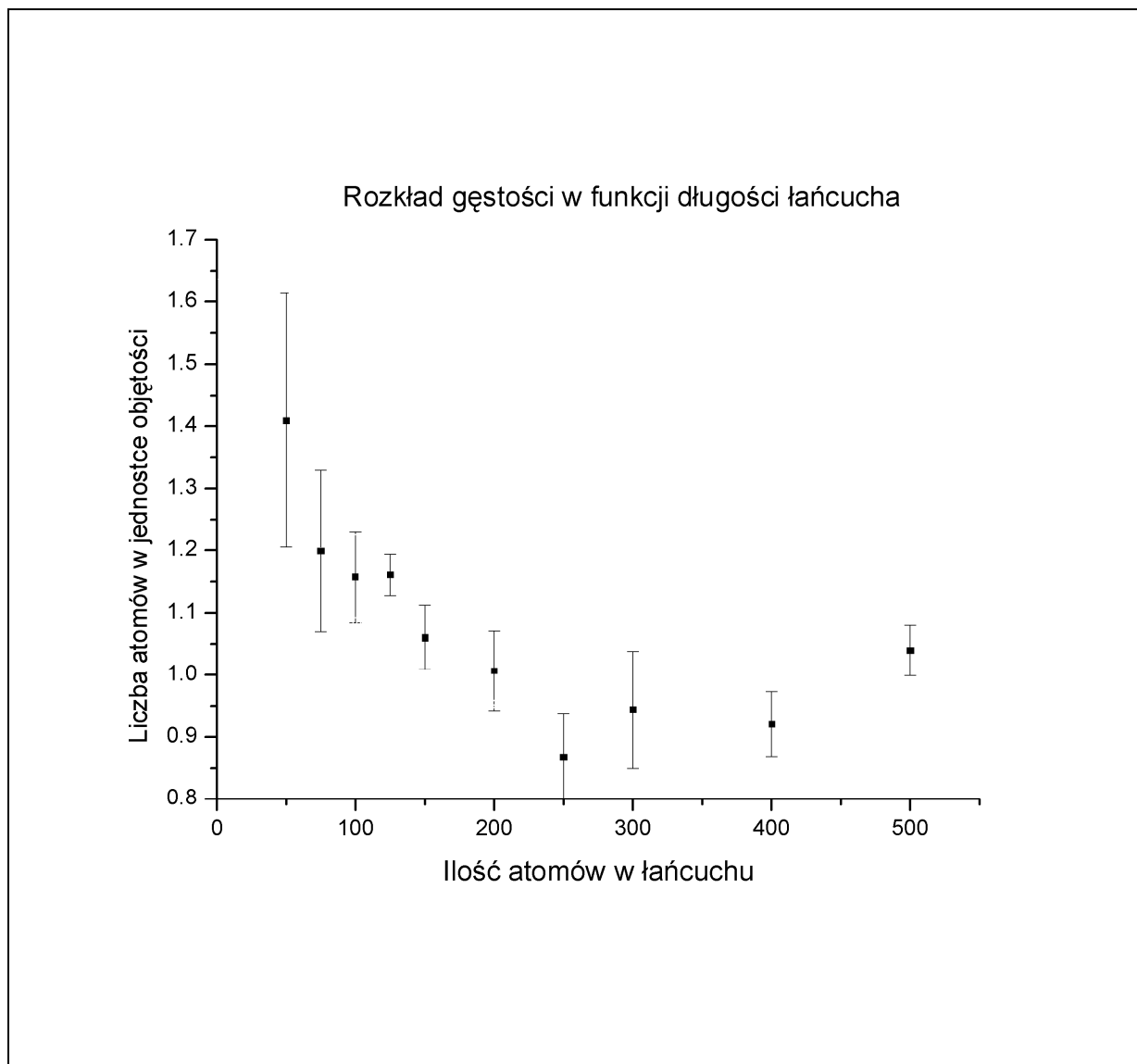
d) $t=4500$



e) $t=10000$

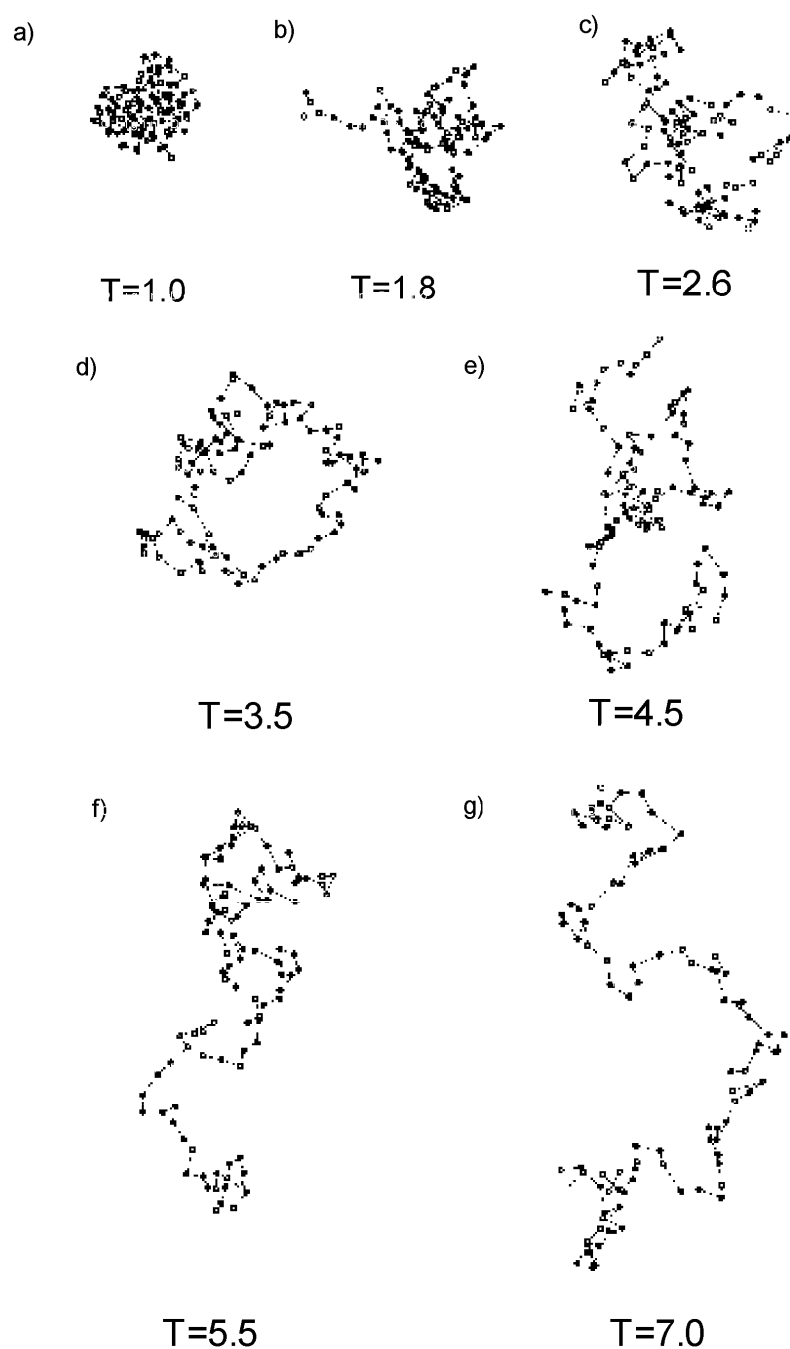


Rysunek 3. Schemat procesu zwijania się polimeru. Polimer będący łańcuchem 100 atomów, zwija się w temperaturze $T=1$. Obok punktów na wykresie podany jest czas, po jakim układ dochodzi do odpowiedniego stanu. Proces zwijania się łańcucha zachodzi pod wpływem sił Lennarda-Jonesa działającymi pomiędzy wszystkimi atomami łańcucha oraz zewnętrznej siły losowej. Łańcuch zaczyna zwijać się od swoich końców (b, c), aby przejść do stanu zwiniętego (d, e) w którym oscyluje wokół położenia równowagi. Warte zauważenia jest również tworzenie się nietrwałych stanów pośrednich wewnątrz łańcucha (c).



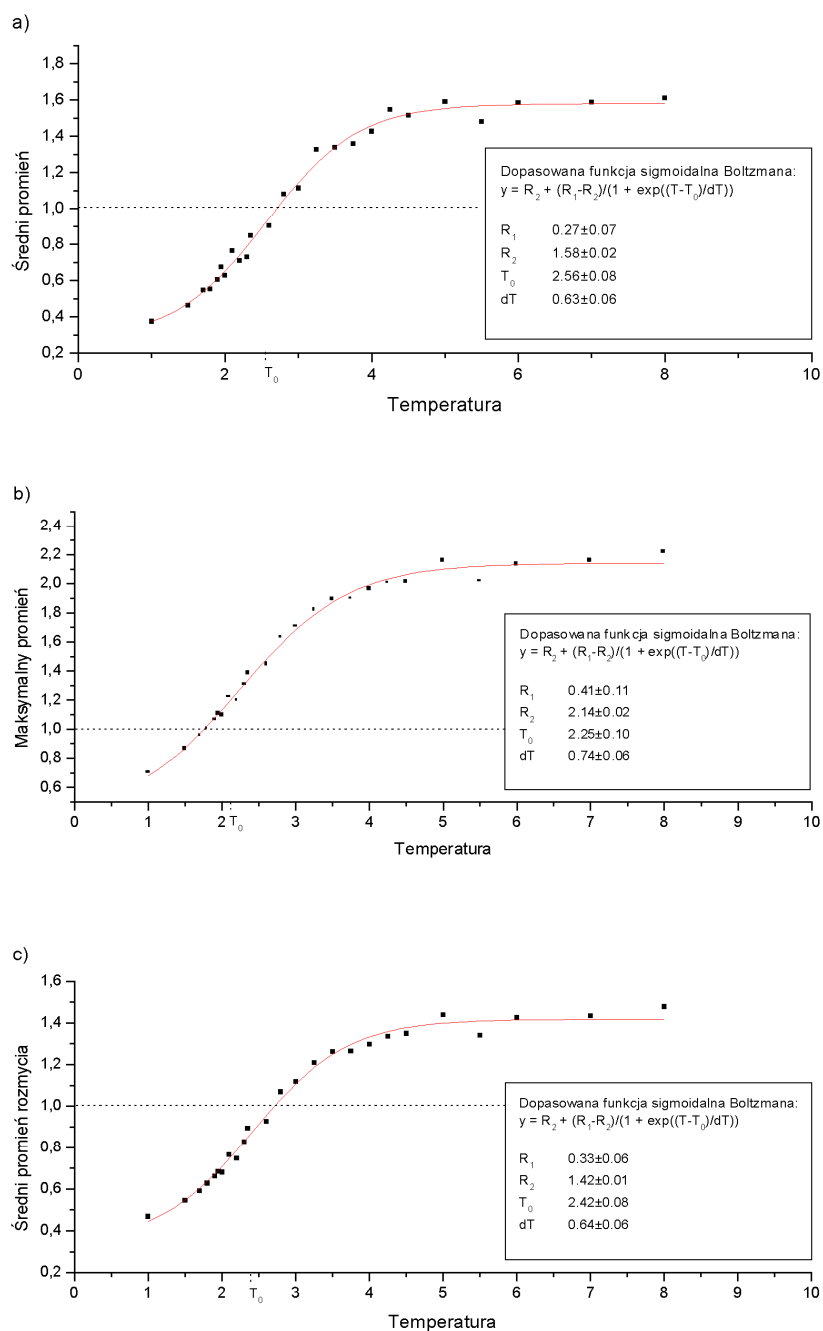
Rysunek 4. Zależność ilości atomów w jednostce objętości od ilości atomów w łańcuchu. Zależność (33) została przedstawiona w celu pokazania, że w mniejszych układach atomy zwiniętego polimeru są gęściej ułożone niż dla większych układów. Promień polimeru został wyznaczony metodą (35), która najlepiej działa dla układów w stanie zwiniętym. Wartości promienia zostały uśrednione dla różnych symulacji, trwających $5 \cdot 10^4$, $1 \cdot 10^5$, $1.5 \cdot 10^5$ i $2 \cdot 10^5$ kroków czasowych. Symulacje zostały przeprowadzone począwszy od stanu zwiniętego, w zakresie temperatur $T=2$ do $T=0$.

Schemat procesu rozwijania się łańcucha 100 atomów



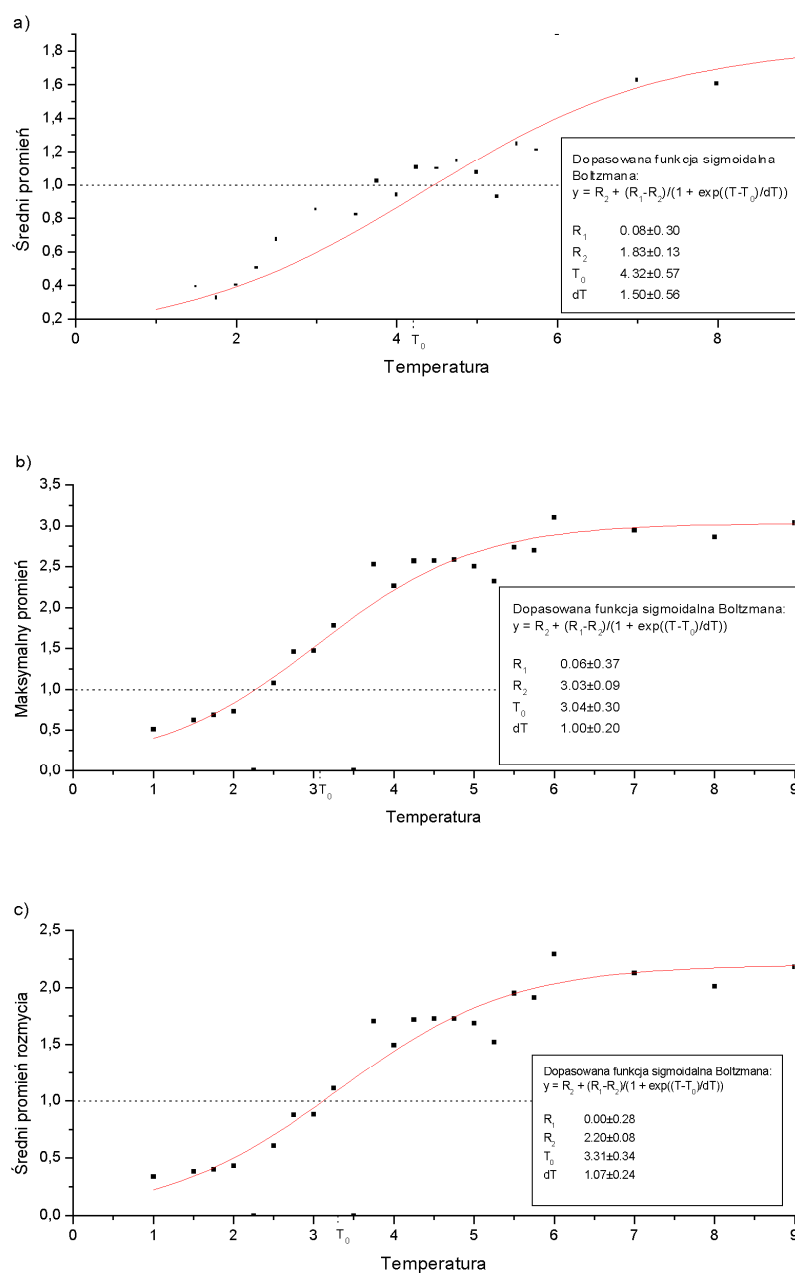
Rysunek 5. Schemat procesu rozwijania się polimeru pod wpływem wzrastającej temperatury. Schemat został wykonany dla polimeru o długości 100 atomów. Dla niskich temperatur (a) układ pozostaje w stanie zwiniętym. W przedziale temperatur (b-e) polimer jest częściowo rozwinięty, i dopiero dla najwyższych temperatur przechodzi do stanu rozwiniętego (f-g).

Promień polimeru dla łańcucha 100 atomów



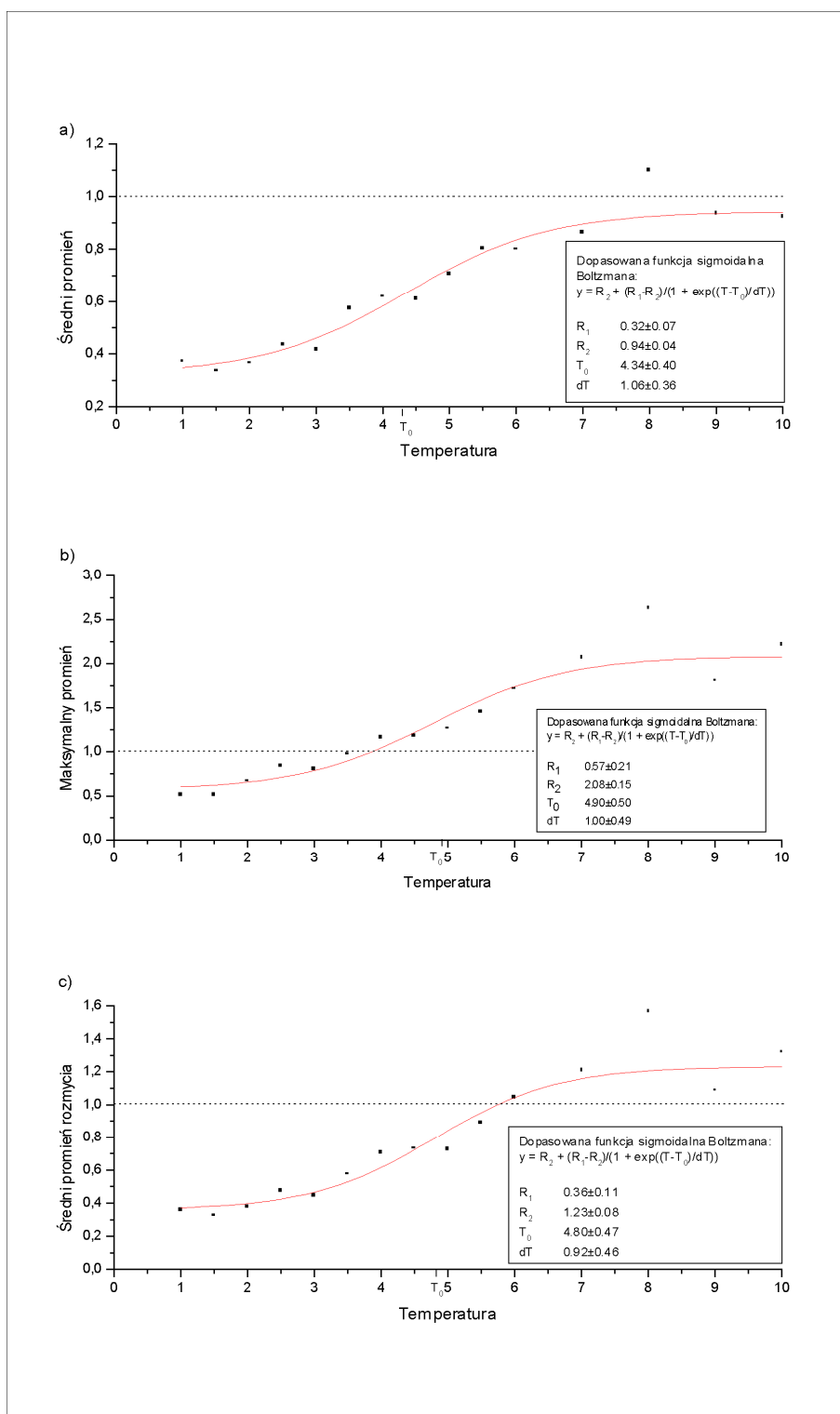
Rysunek 6. Promień polimeru w funkcji temperatury dla łańcucha 100 atomów. Symulacje trwały $8 \cdot 10^5$ kroków czasowych i były przeprowadzane w stałej, ustalonej temperaturze. Promień został uśredniony po trajektorii, oraz znormalizowany poprzez parametr $0.5\sqrt{N}$, gdzie N jest długością łańcucha. Temperatura T_0 jest zadana jako punkt przegięcia funkcji sigmoidalnej Boltzmana i oznacza przybliżoną temperaturę, w której polimer rozwija się najszybciej. Okazuje się, że polimer rozwija się stopniowo, i osiąga stan rozwinięty w temperaturze $T \cong 4.5$.

Promień polimeru dla łańcucha 500 atomów



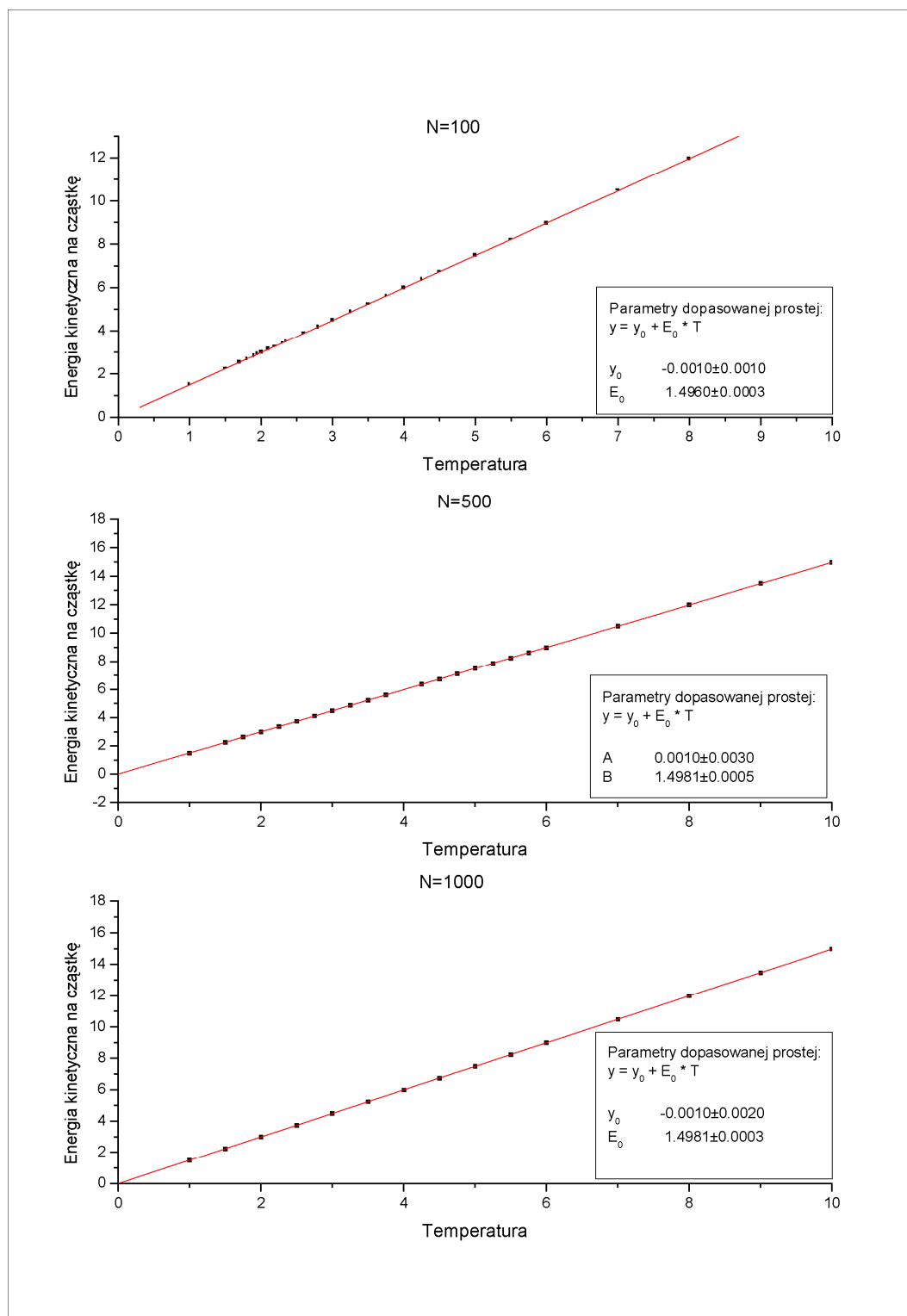
Rysunek 7. Promień polimeru w funkcji temperatury dla łańcucha 500 atomów. Symulacje trwały $3 \cdot 10^5$ kroków czasowych i były przeprowadzane w stałej, ustalonej temperaturze. Temperatura T_0 jest zadana jako punkt przegięcia funkcji sigmoidalnej Boltzmana i oznacza przybliżoną temperaturę, w której polimer rozwija się najszybciej. Promień został uśredniony po trajektorii, oraz znormalizowany poprzez parametr $0.5\sqrt{N}$, gdzie N jest długością łańcucha. Podobnie jak dla układu 100 atomów polimer rozwija się stopniowo, lecz stan w pełni rozwinięty osiąga dla wyższej temperatury $T \cong 6.0$. Ciekawym faktem jest również widoczna lepsza zbieżność wartości promienia dla metod (b,c).

Promień polimeru dla łańcucha 1000 atomów



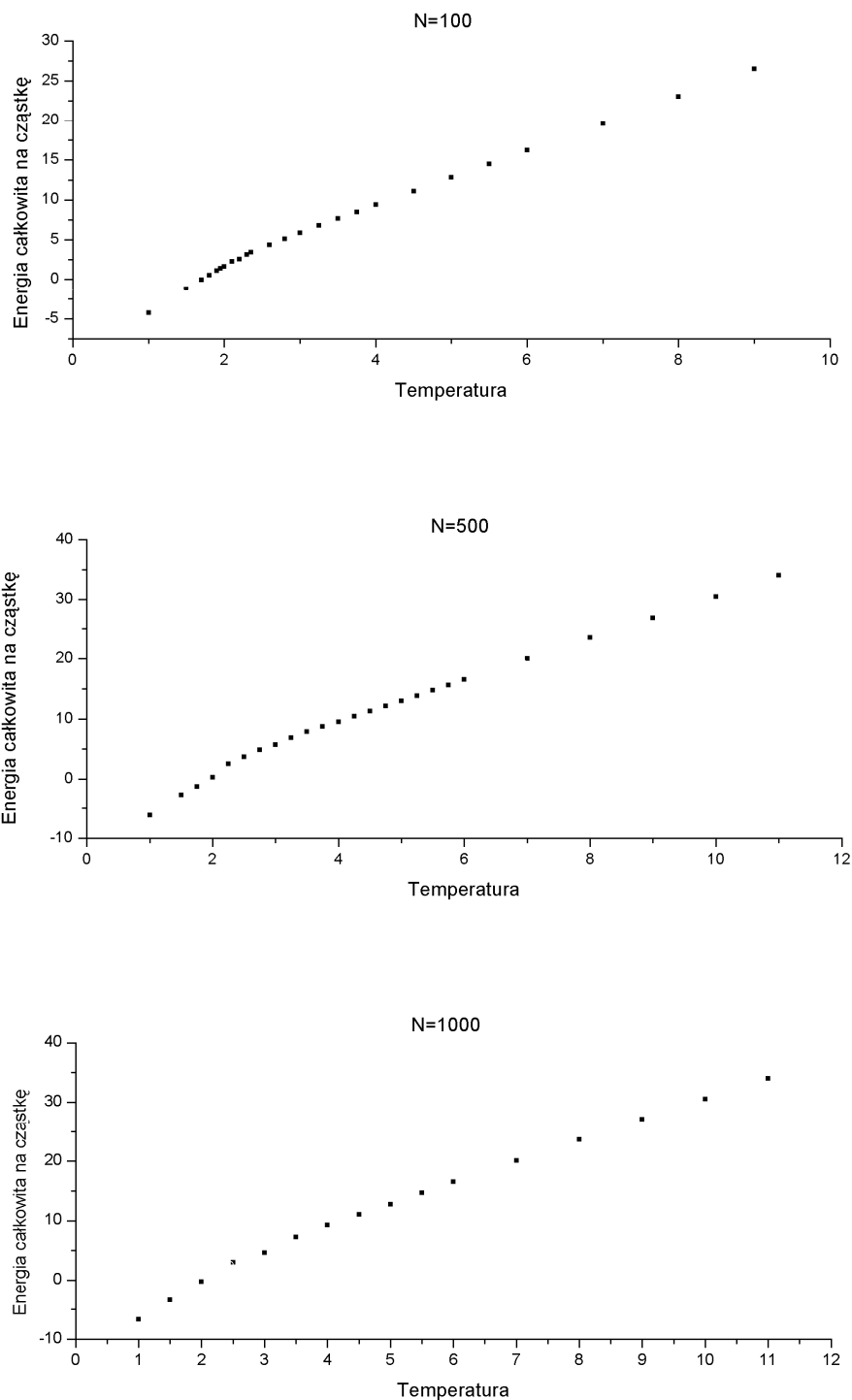
Rysunek 8. Promień polimeru w funkcji temperatury dla łańcucha 1000 atomów. Symulacje trwały $1.5 \cdot 10^5$ kroków czasowych i były przeprowadzane w stałej, ustalonej temperaturze. Temperatura T_0 jest zadana jako punkt przegięcia funkcji sigmoidalnej Boltzmana i oznacza przybliżoną temperaturę, w której polimer rozwija się najszybciej. Promień został uśredniony po trajektorii, oraz znormalizowany poprzez parametr $0.5\sqrt{N}$, gdzie N jest długością łańcucha. Podobnie jak dla układu 500 atomów polimer rozwija się stopniowo, jednak stan w pełni rozwinięty osiąga dla wyższej temperatury, równej $T \approx 8.0$.

Średnia energia kinetyczna na cząstkę



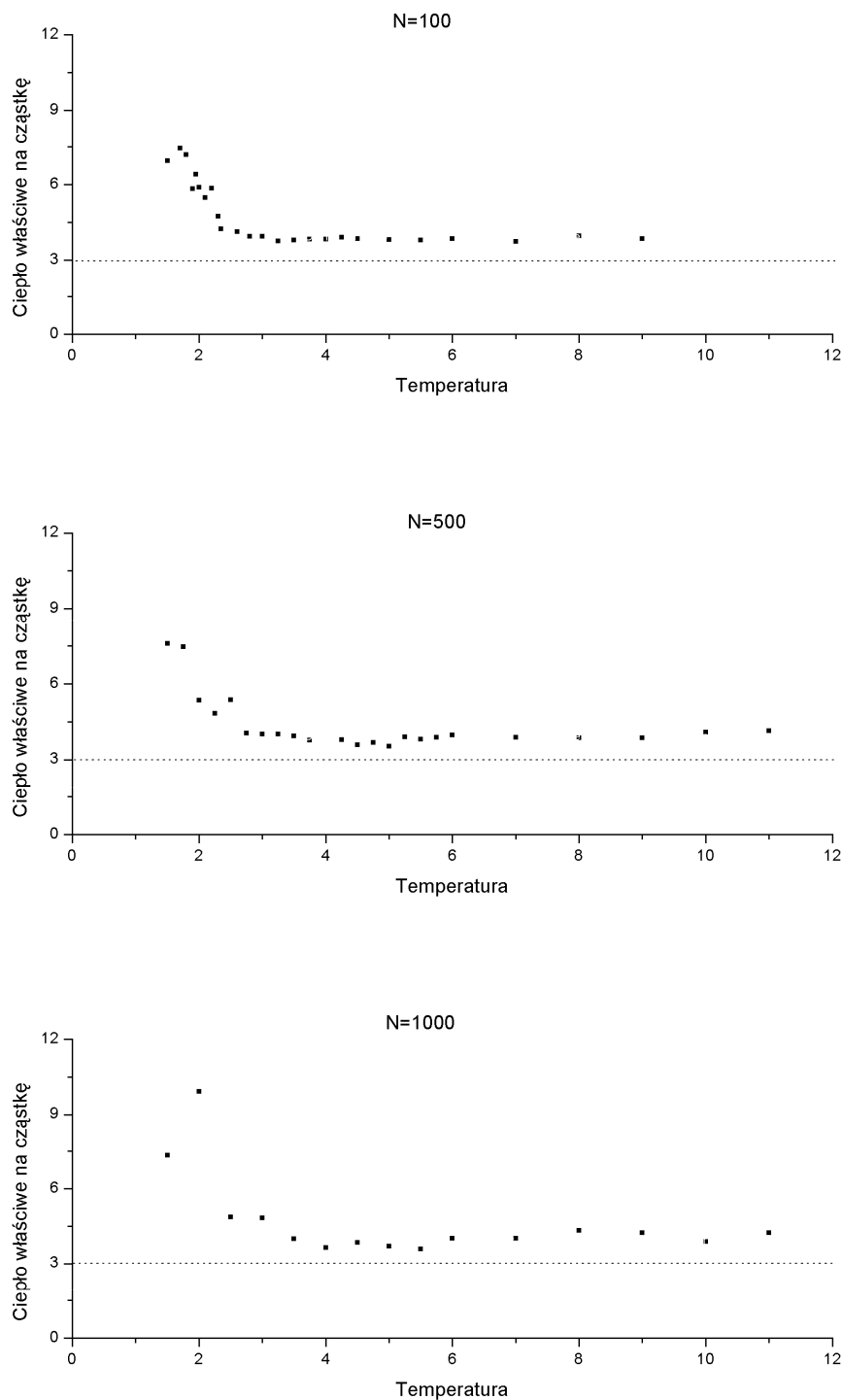
Rysunek 9. Średnia energia kinetyczna na cząstkę w funkcji temperatury. Energia jest wyznaczona dla układów 100, 500 i 1000 cząstek, poprzez symulacje przeprowadzone w stałej, ustalonej temperaturze. Jak widać energia jest proporcjonalna do $1.5T$, co jest zgodne z zasadą ekwipartycji energii (38) i oznacza, że amplituda wprowadzonego do układu szumu stochastycznego (8) w poprawny sposób kontroluje temperaturę układu.

Średnia energia całkowita na cząstkę



Rysunek 10. Średnia energia całkowita na cząstkę w funkcji temperatury. Symulacje zostały przeprowadzone dla układów 100, 500 i 1000 cząstek w stałej, ustalonej temperaturze. Temperaturę, w której zmienia się zachowanie punktów pomiarowych, można powiązać z temperaturą w której polimer rozwija się najszybciej.

Ciepło właściwe na cząstkę



Rysunek 11. Ciepło właściwe na cząstkę w funkcji temperatury. Ciepło właściwe zostało wyznaczone dla polimerów zawierających 100, 500 i 1000 atomów poprzez symulacje w stałej, ustalonej temperaturze. Na wykresie dla 100 atomów wyraźnie widoczny jest pik w temperaturze $T \approx 2.0$, który odpowiada procesowi najszybszego rozwijania się polimeru. Dla pozostałych układów trudno ustalić położenie charakterystycznej temperatury, prawdopodobnie z powodu zbyt krótkiego czasu obliczeń. Ciepło właściwe w granicy wysokich temperatur dąży do klasycznej granicy, wynoszącej 3.0.