

Laboratorium 14

Dynamika molekularna (część 2)

Zadania do wykonania:

1) Dodaj do metody obliczającej przyspieszenia atomów fragment kodu, który oblicza przyspieszenia wynikające ze zderzeń atomów z elastycznymi ścianami pojemnika. Poniższy fragment kodu ilustruje obliczenia dla pionowych ścian. Zwróć uwagę, że obliczając całkowitą energię układu musisz uwzględnić energię oddziaływania z ścianami pojemnika (elasticEnergy). Parametr **wallStiffness**=50.

```
elasticEnergy=0;
for (int i=0; i<nAtoms; i++){

    double d=0;

    if (x[i] < 0.5) {
        d=0.5 - x[i];
        ax[i]+= wallStiffness * d;
        elasticEnergy+=0.5*wallStiffness *d*d;
    }

    if (x[i] > (boxWidth - 0.5)) {
        d=(boxWidth - 0.5 - x[i]);
        ax[i]+= wallStiffness * d;
        elasticEnergy+=0.5*wallStiffness*d*d;
    }
}
```

2) Napisz klasę, która umożliwi ci zamianę fizycznych współrzędnych atomu na współrzędne ekranowe. Na przykład atom o współrzędnych (100,100) ma współrzędne ekranowe (width,0) gdzie width to szerokość okna graficznego.

3) Napisz metodę, która będzie losowo rozmieszczała atomy wewnątrz kwadratu (pojemnika) o zadanym boku **boxWidth**. Użyj generatora liczb losowych o rozkładzie normalnym i odchyleniu standardowym 3 do nadania składowym prędkości atomów początkowych wartości. Algorytm powinien wykluczać możliwość dodania kolejnego atomu w zbyt bliskim otoczeniu jednego z już wcześniej dodanych atomów. Dlaczego?

4) Wykonaj animację ruchu atomów i wykonaj wykresy energii kinetycznej, potencjalnej, sprężystej i całkowitej podczas trwania symulacji. Przyjmij **boxWidth**=100 i liczbę atomów **nAtoms**<1000.