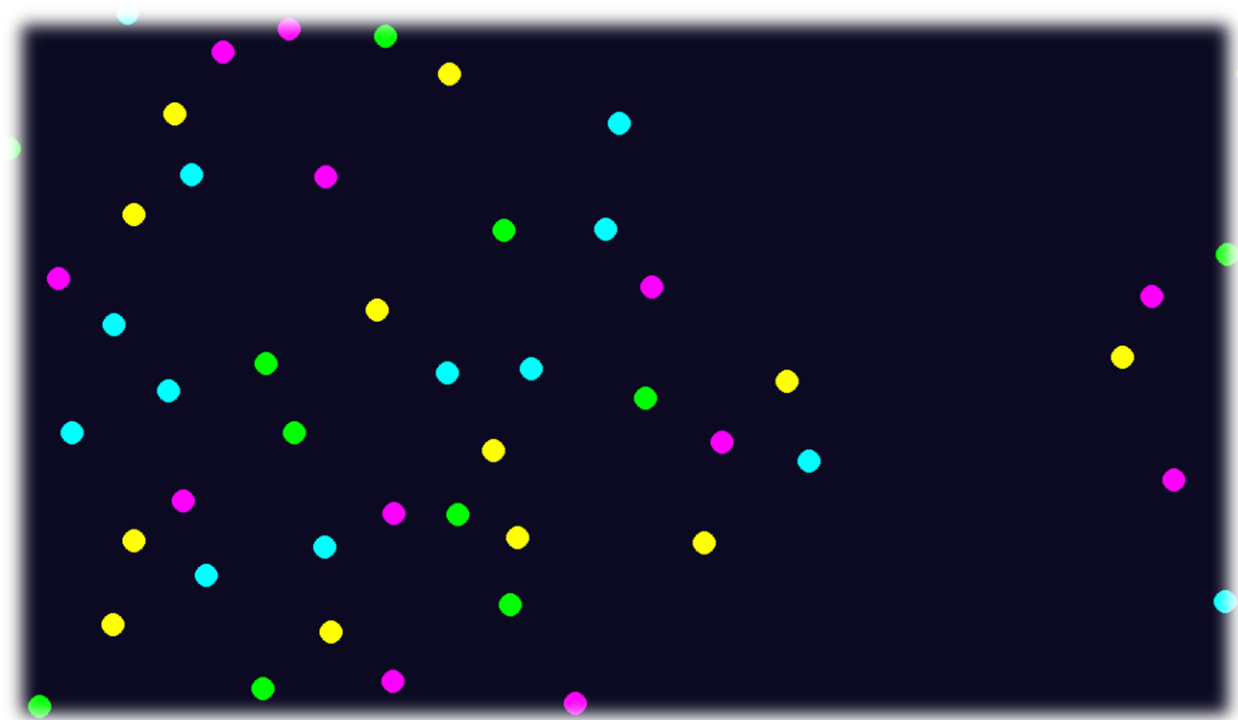


# Molecular Dynamics



برهمکنش میان اتم‌های گاز آرگون را به صورت Lennard Jones با الگوریتم velocity verlet و یک سیستم متشکل از ۱۰۰ ذره آرگون را در فضای دو بعدی (آنسامبل میکروکانونیک) برای چند انرژی مختلف شبیه سازی می کنیم.

## شرایط اولیه:

مکان ذرات به صورت کریستالی در نیمه چپ سیستم قرار دارد.  
سرعت ذرات به صورت تصادفی تعیین می شود به شرطی که سرعت مرکز جرم صفر باشد.  
شرایط مرزی پریودیک است.

## الگوریتم:

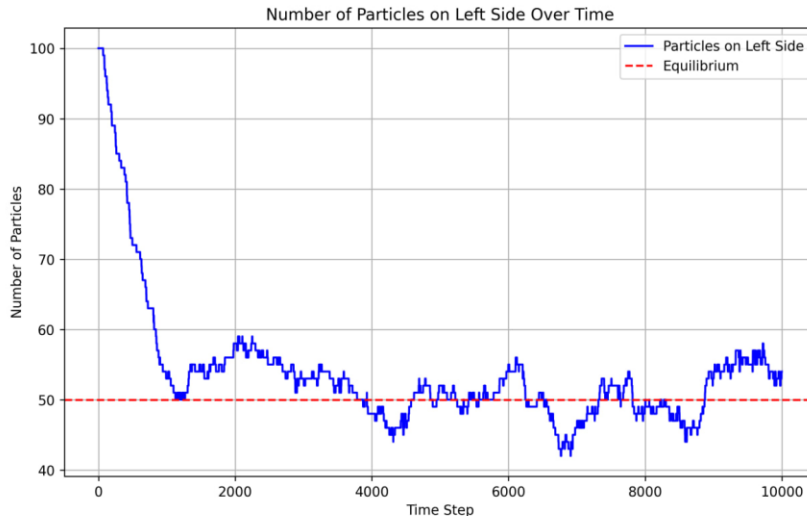
هر ذره یک کلاس است با مکان، سرعت، شتاب، رنگ، شعاع و جرم. در متود `move()` در کلاس Particle الگوریتم ورله سرعتی پیاده سازی شده است.

### 1- ترچکتوری سیستم به صورت ویدیو

برای نمایش شبیه سازی از pygame استفاده کردیم. ویدیو شبیه سازی MD.mp4 در فایل موجود است.

### 2- نمودار تعداد ذرات در سمت چپ سیستم (معیاری از تعادل)

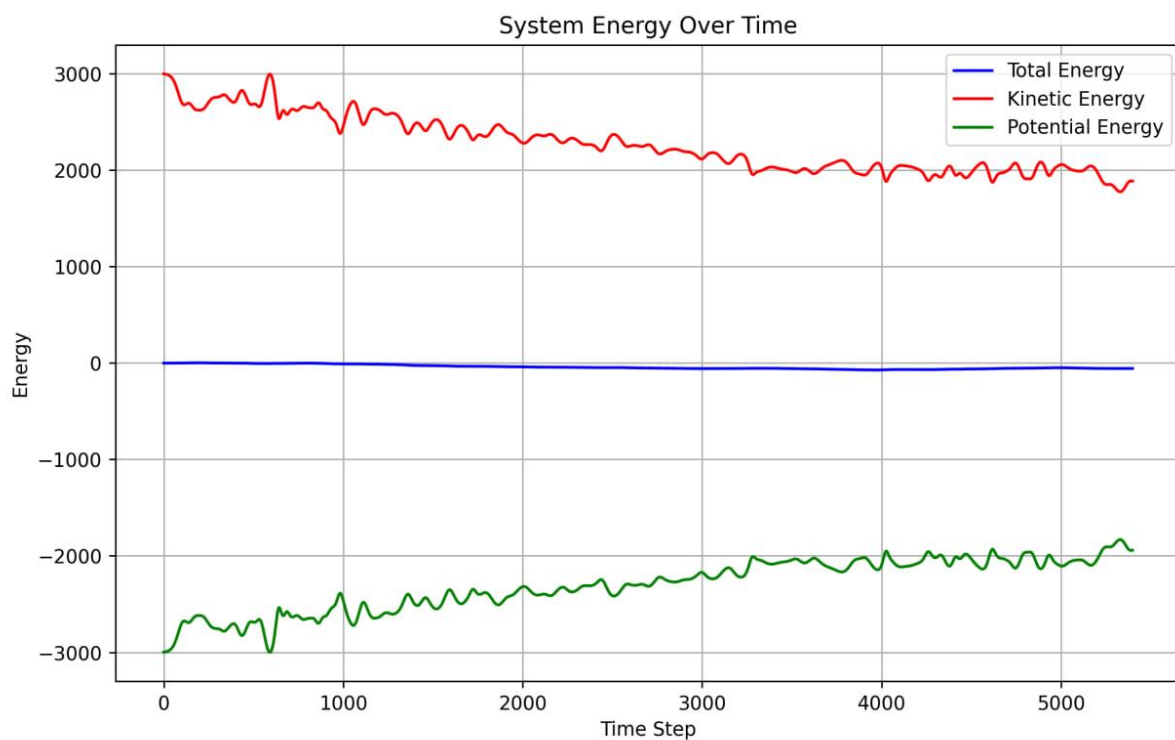
انتظار داریم ابتدا 100 ذره در سمت چپ صفحه باشد و به مرور هنگامی که سیستم به تعادل می رسد 50 ذره در سمت چپ صفحه باشد.



همانطور که انتظار می رفت سیستم پس از تقریباً 1000 قدم به تعادل رسیده است و تعداد ذرات در سمت چپ حول 50 نوسان می کند.

### 3- تحقیق بقای انرژی در سیستم

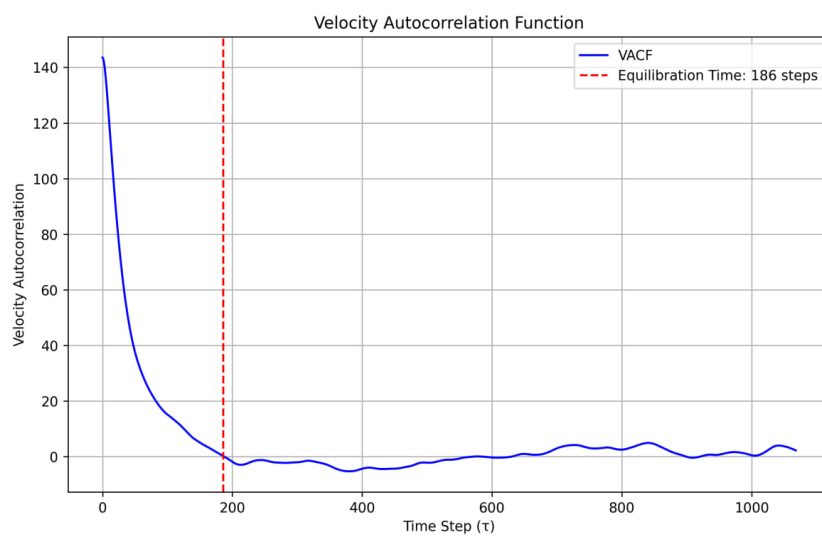
انرژی پتانسیل را از پتانسیل لِنارد جونز محاسبه می کنیم و انرژی جنبشی کل را با جمع کردن انرژی جنبشی همه ذرات بدست می آوریم. با الگوریتم ورله سرعتی انتظار داریم انرژی کل پایسته بماند.



طبق انتظار، گرچه انرژی جنبشی و پتانسیل افت و خیز دارند ولی این افت و خیزها متقارن است و در نهایت انرژی کل به خوبی ثابت می ماند.

#### 4- تابع خودهمبستگی سرعت ذرات و محاسبه زمان تعادل سیستم

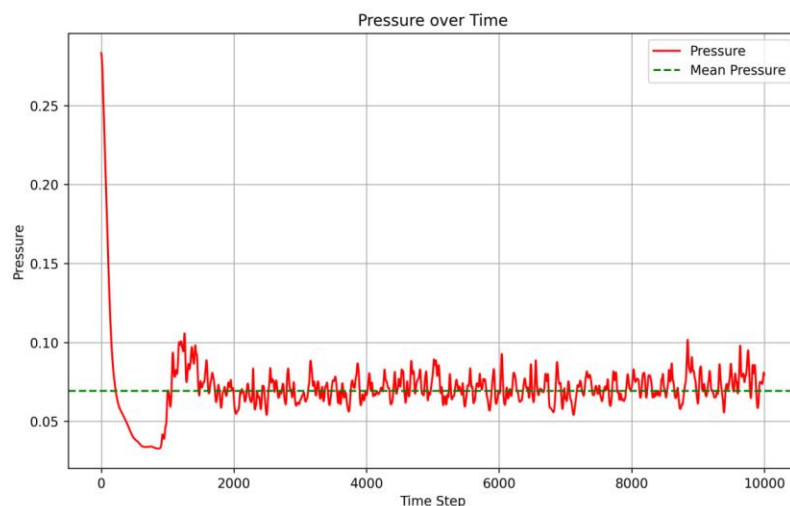
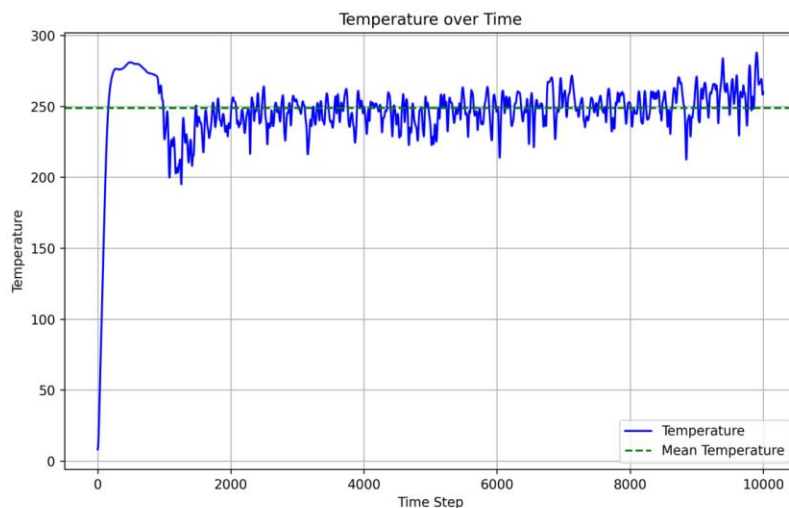
انتظار داریم خود همبستگی سرعت ها به صورت نمایی کاهش یابد. جایی که خود همبستگی به مقدار  $1/e$  ام برسد را زمان واهلش سیستم تعریف می کنیم.



رفتار نمایی خودهمبستگی مشاهده می شود. طبق این نمودار زمان واهلش سیستم برابر 186 است. یعنی سیستم بعد از 186 قدم به تعادل می رسد.

#### 5- محاسبه دما و فشار سیستم در تعادل

انتظار داریم دما و فشار بعد از زمان واهلش ثابت شوند. از زمان واهلش محاسبه شده در قسمت قبل استفاده می کنیم تا میانگین دما و فشار را بعد از زمان واهلش محاسبه کنیم. زمان واهلش با ثوابت جدید برابر 1000 است.



$$\langle T \rangle = 250$$

$$\langle P \rangle = 0.07$$

#### 6- محاسبه ضریب پخش diffusion

با انتگرال گیری روی تابع خودهمبستگی سرعت می توان ضریب پخش را بدست آورد. از np.trapz برای انتگرال گیری عددی استفاده می کنیم.

$$D = 1301.6$$

7- تحقیق رابطه واندروالس و به دست آوردن ثابت های  $a$  و  $b$  معادله حالت گاز واندروالس به شکل زیر است.

$$p = \frac{nRT}{V - nb} - \frac{n^2 a}{V^2}$$

که می توان به این صورت آن را بازنویسی کرد.

$$p = \frac{N k_B T}{V - N b'} - \frac{N^2 a'}{V^2}$$

Where:

- $b' = \frac{b}{N_A}$
- $a' = \frac{a}{N_A^2}$

برای دو بعد نیز به جای حجم باید مساحت قرار دهیم.

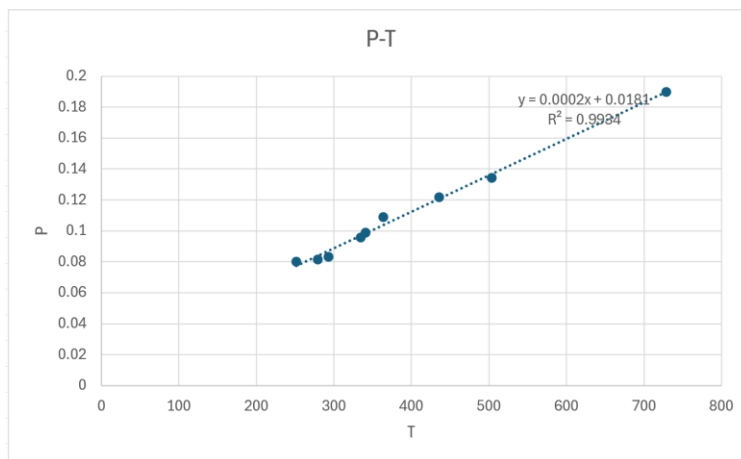
حجمی که در شبیه سازی استفاده شده است، ضرب تعداد پیکسل های طول و عرض صفحه نمایش است. برای اسکیل کردن حجم از شعاع برخورد مولکول آرگون استفاده می کنیم.

$$\sigma = 0.34 \text{ nm}$$

در شبیه سازی سیگما برابر 70 پیکسل است و مساحت صفحه شبیه سازی 700\*1200 می باشد.

$$A = 1200 \times 700 \text{ pixel} = 19.82 \text{ nm}$$

با تغییر  $v_{\text{max}}$  (ماکسیمم سرعت اولیه) انرژی سیستم تغییر می کند و می توانیم نمودار P-T را رسم کنیم. از شیب و عرض از مبدا این نمودار می توان  $a$ ,  $b$  را محاسبه کرد.



پس از محاسبه و تبدیل ابعاد داریم.

$$a = 1.28 \times 10^6$$

$$b = 3.4 \times 10^5$$

$$a_{real} = 4.57 \times 10^9$$

$$b_{real} = 1.30 \times 10^5$$

مقدار خطاها بسیار بالا است.

## 8- تغییر فاز سیستم با کاهش دما

با کم کردن دما یا به عبارتی  $v_{max}$  در واقع داریم یک سیال را شبیه سازی می کنیم و انتظار داریم پس از مدتی مولکول ها در cluster هایی جمع شوند.