

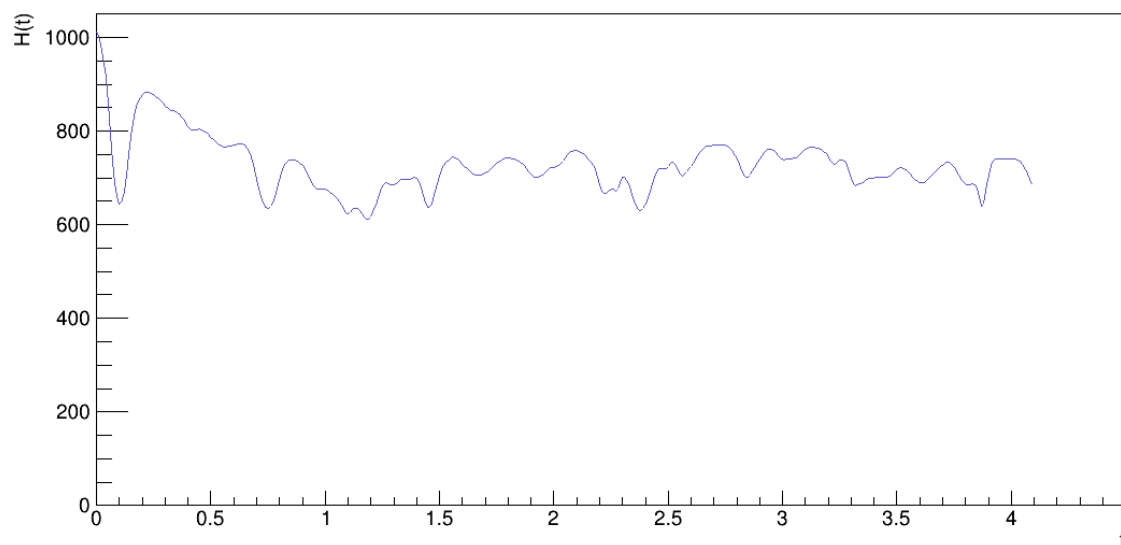
Symulacje kryształu argonu metodą dynamiki molekularnej

Program realizujący zadanie napisano w języku C++. Zaimplementowano dwie klasy: `vector`, która zawierała trzy składowe kartezjańskie oraz metody pozwalające na podstawowe działania na wektorach, a także klasę `argon`, przechowującą wszelkie podstawowe dane (wektory położeń, pędów i sił działających na poszczególne cząstki, parametry symulacji) oraz metody symulujące, a także zapisujące dane. Oddzielnie powstał także program do wizualizacji ruchu atomów. On także napisany został w C++ z wykorzystaniem biblioteki GLUT (OpenGL Utility Toolkit).

Atomy argonu układano w romboidalnym kryształe na siatce, na której boku było n atomów. Nadawano im losowo pędy, które zależały od temperatury. Każdy atom działał na inne siłami van der Waalsa, a ponadto dookoła nich rozpięto naczynie sferyczne o promieniu L , po opuszczeniu którego wywierały nań ciśnienie i były ściągane dodatkowymi siłami do wnętrza.

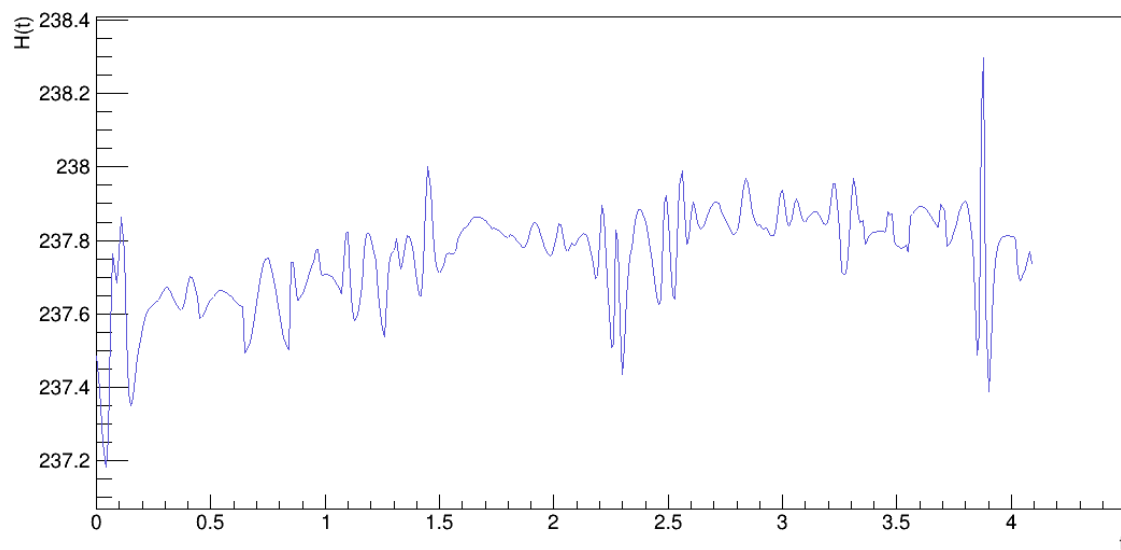
Na początku przeprowadzono test programu i stabilności algorytmu. W tym celu przeprowadzono 4 symulacje z różnym krokiem czasowym τ : 10^{-2} , 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} . Dla uproszczenia tego etapu przyjęto $n=3$, $T_0=1000$, $a=0,38$ oraz $L=1,2$. Poniżej widnieją wykresy temperatury oraz energii całkowitej w zależności od czasu dla tych symulacji.

$T(t)$



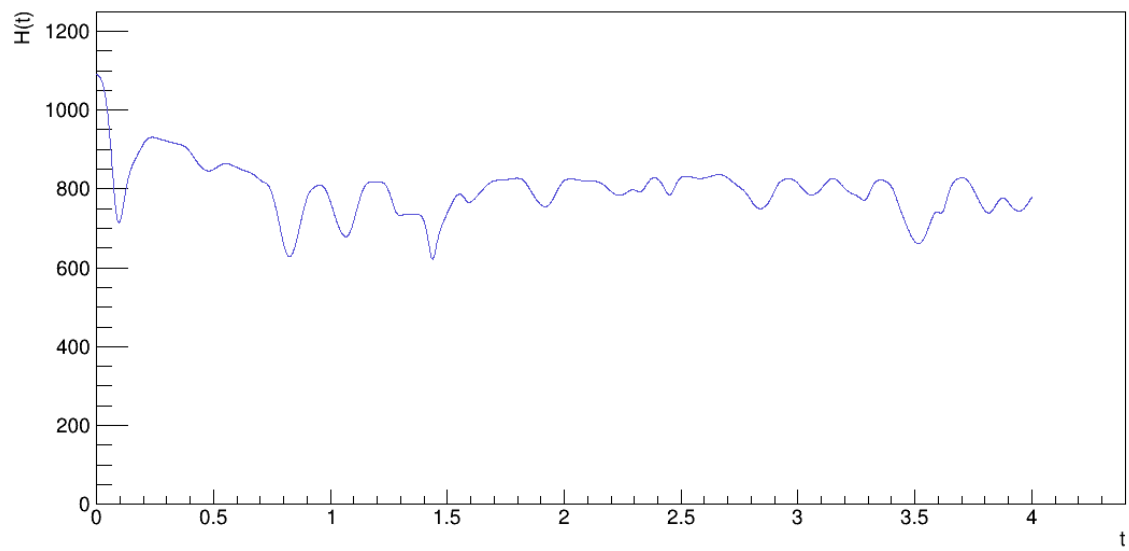
$T(t)$ dla $\tau=0,01$

$H(t)$



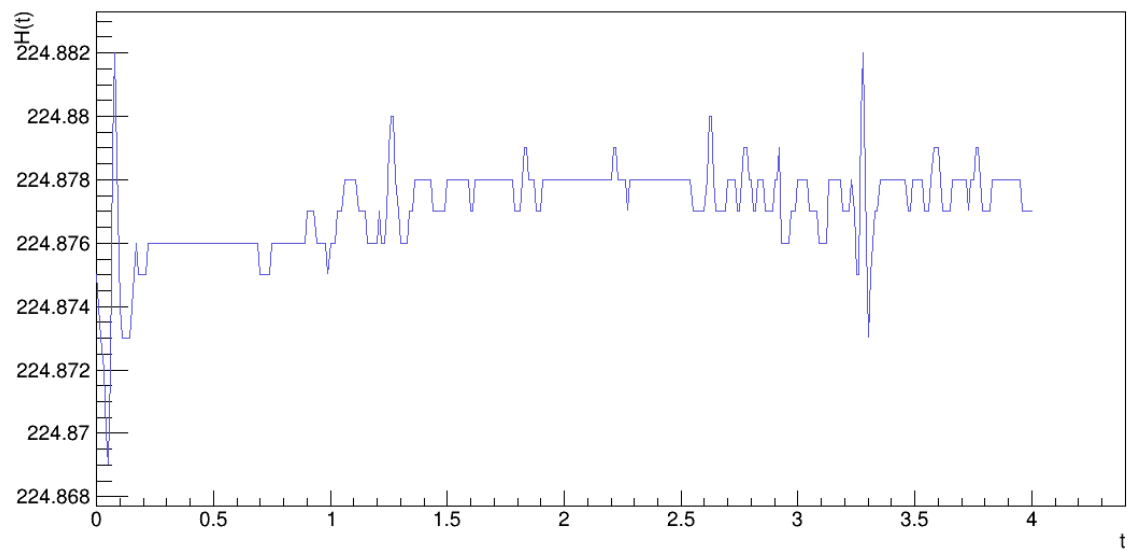
$H(t)$ dla $\tau=0,01$

$T(t)$

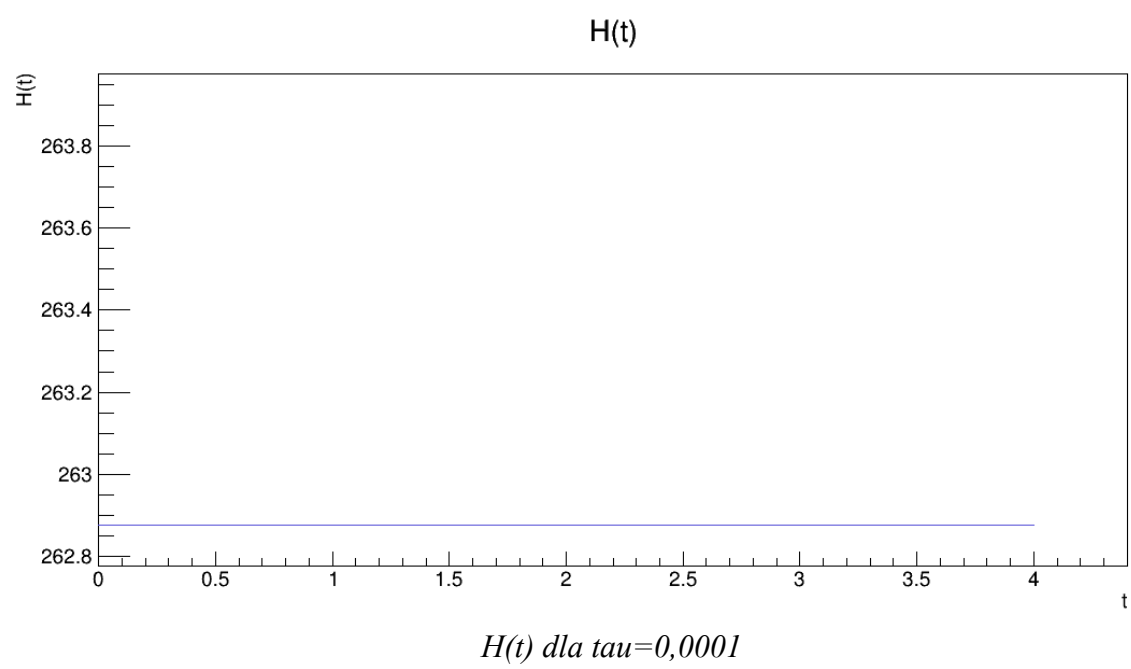
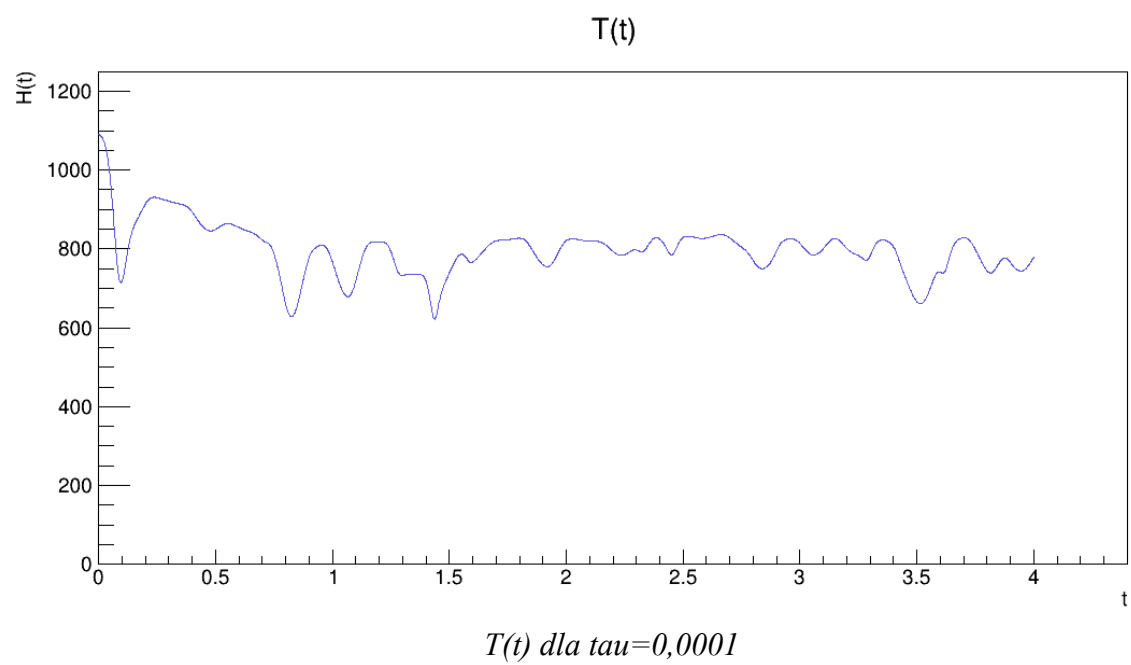


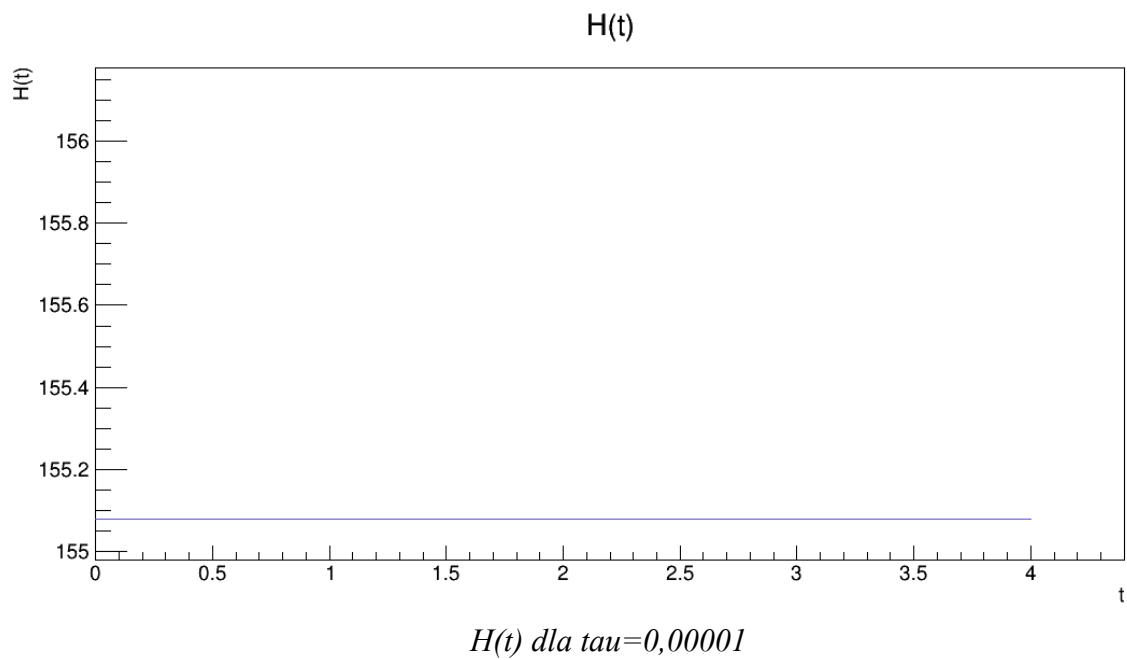
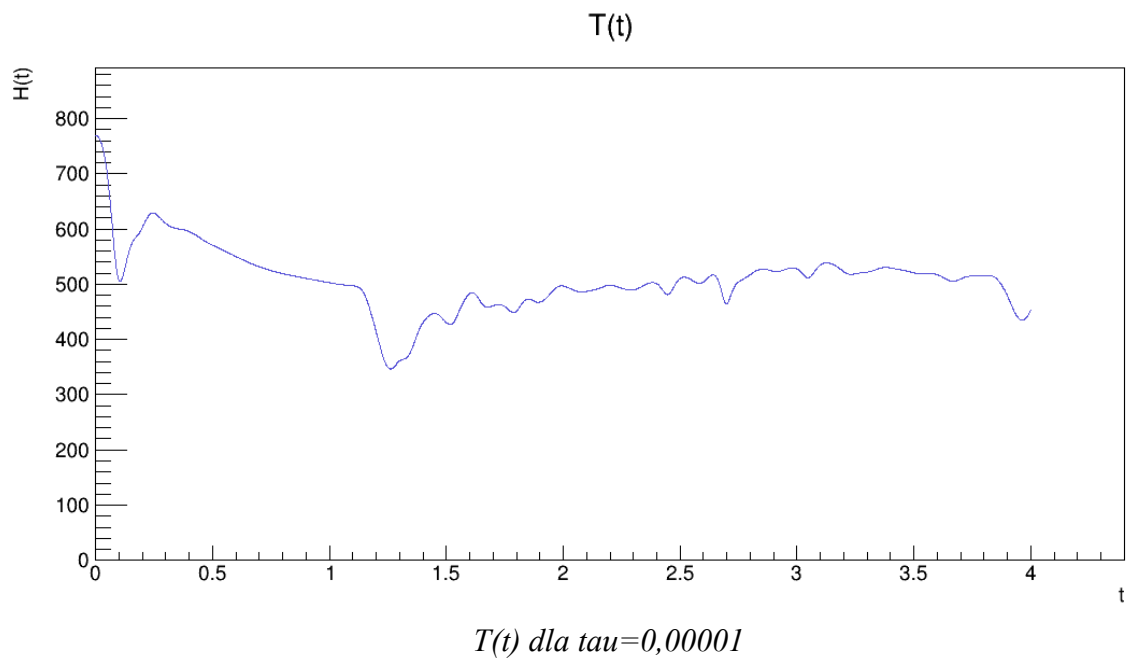
$T(t)$ dla $\tau=0,001$

$H(t)$



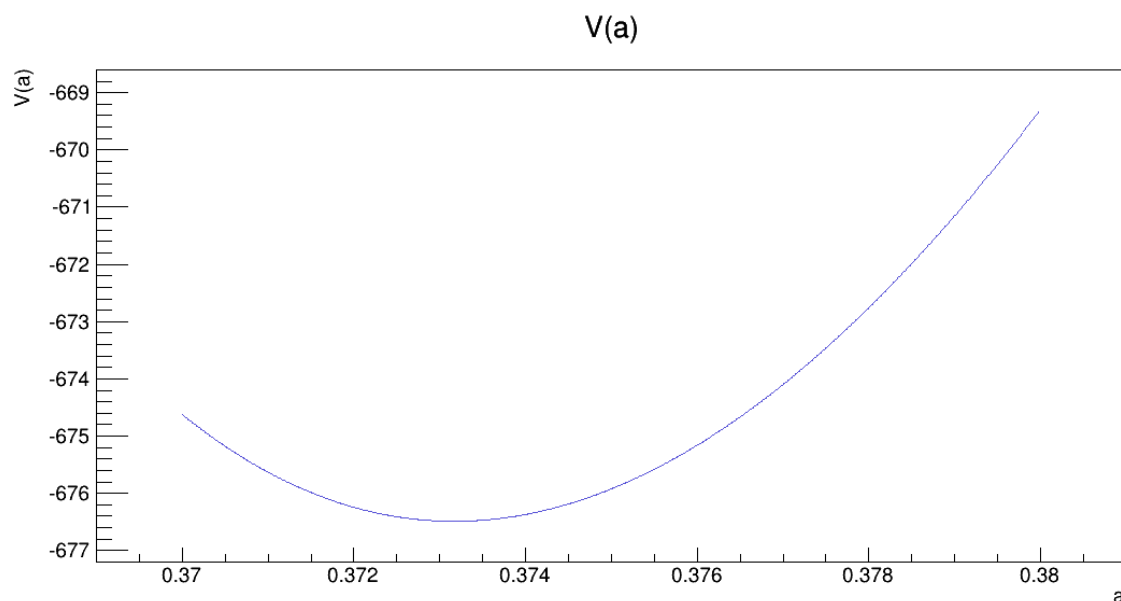
$H(t)$ dla $\tau=0,001$





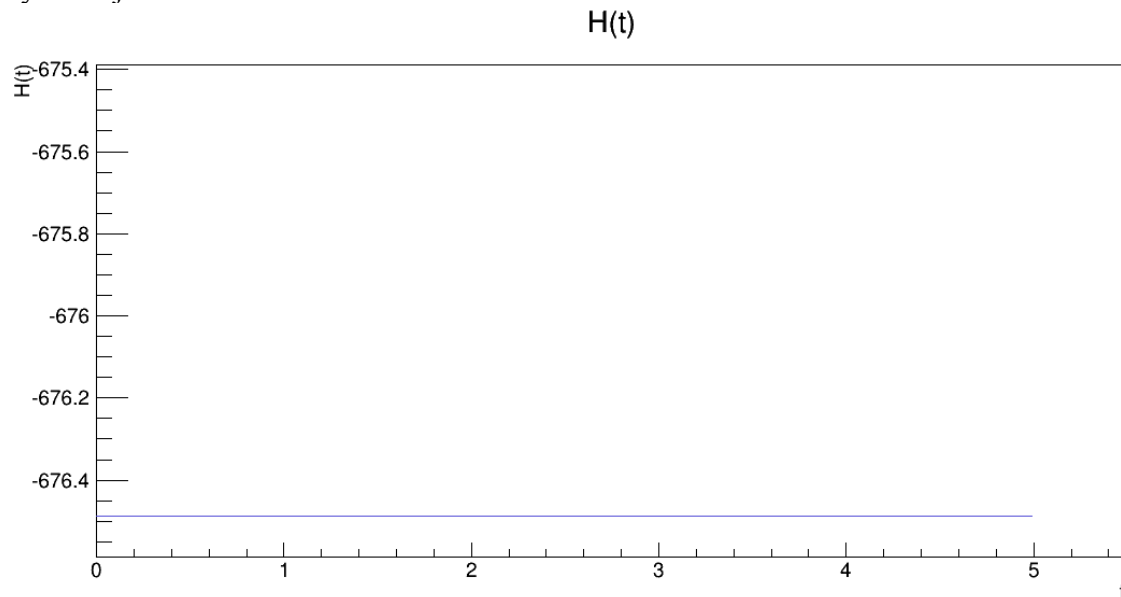
Jak widać dla symulacji z długim czasem całkowania $\tau=0,01$ energia całkowita zmienia się dosyć znacznie, choć powinna być stała. Zmiany hamiltonianu przy $\tau=0,001$ i mniejszym są znikome lub nie ma ich wcale. W dalszych symulacjach przyjęto więc $\tau=0,001$.

Kolejnym krokiem było obliczenie minimalnej potencjalnej energii początkowej dla różnych wartości odległości międzyatomowej a . Wykonano obliczenia, a na ich podstawie wykres, dla stałej sieciowej z zakresu od 0,37 do 0,38. Okazało się, że początkowa energia potencjalna ma swoje minimum dla stałej sieciowej $a=0,37317$ i taką wartość przyjmowano w dalszych symulacjach

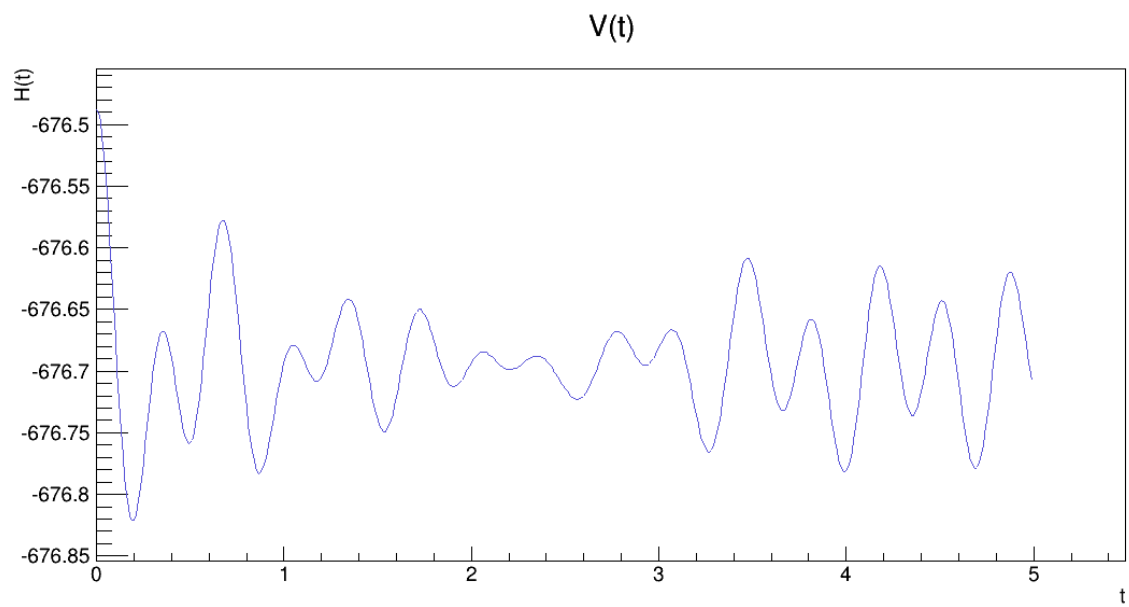
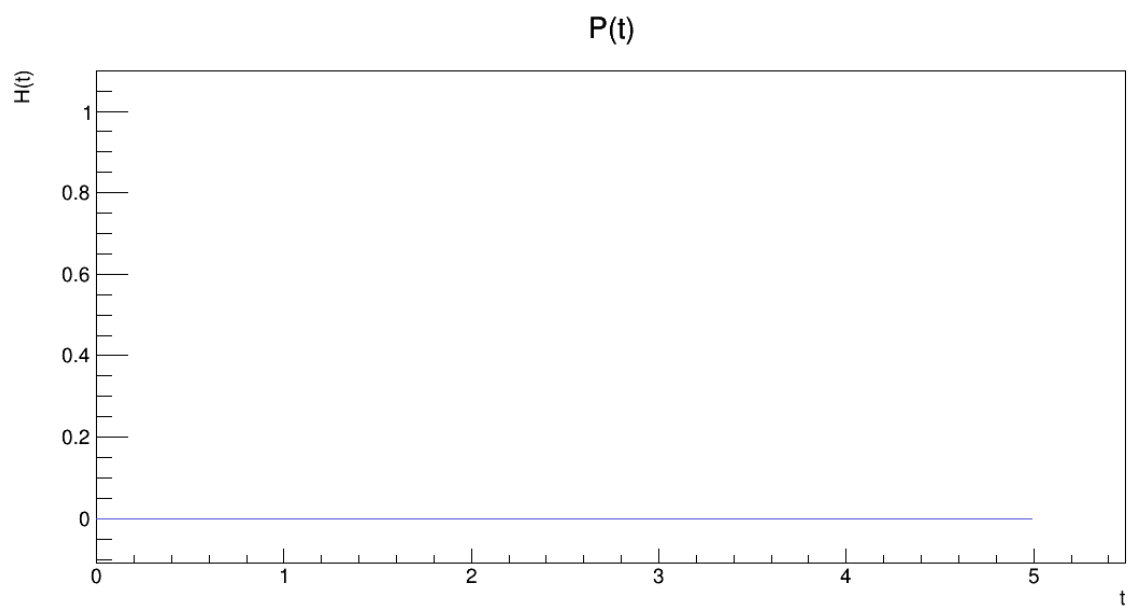
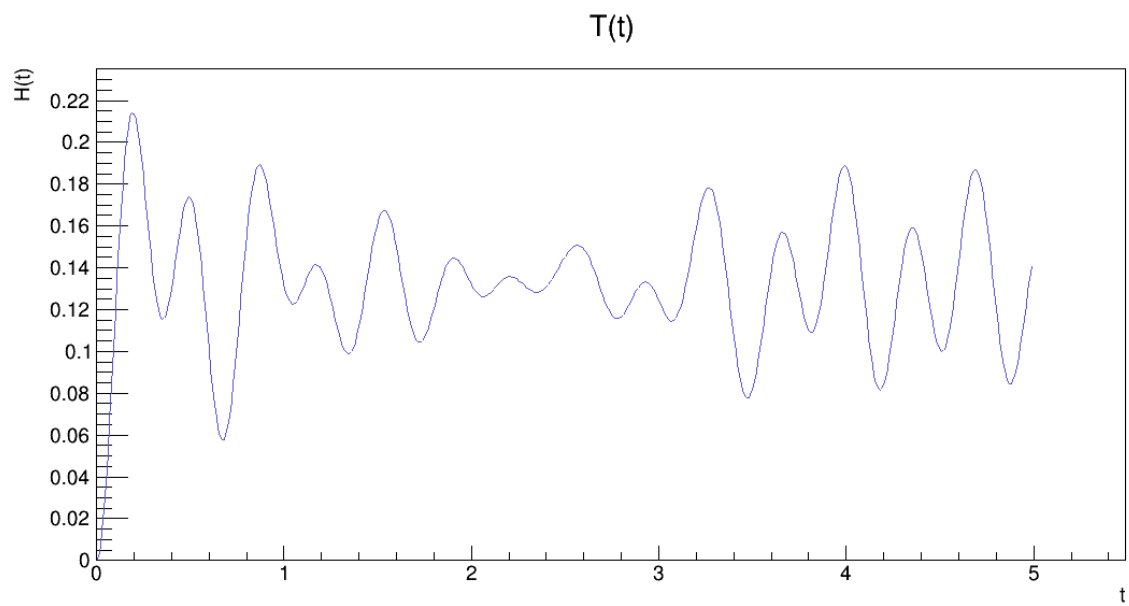


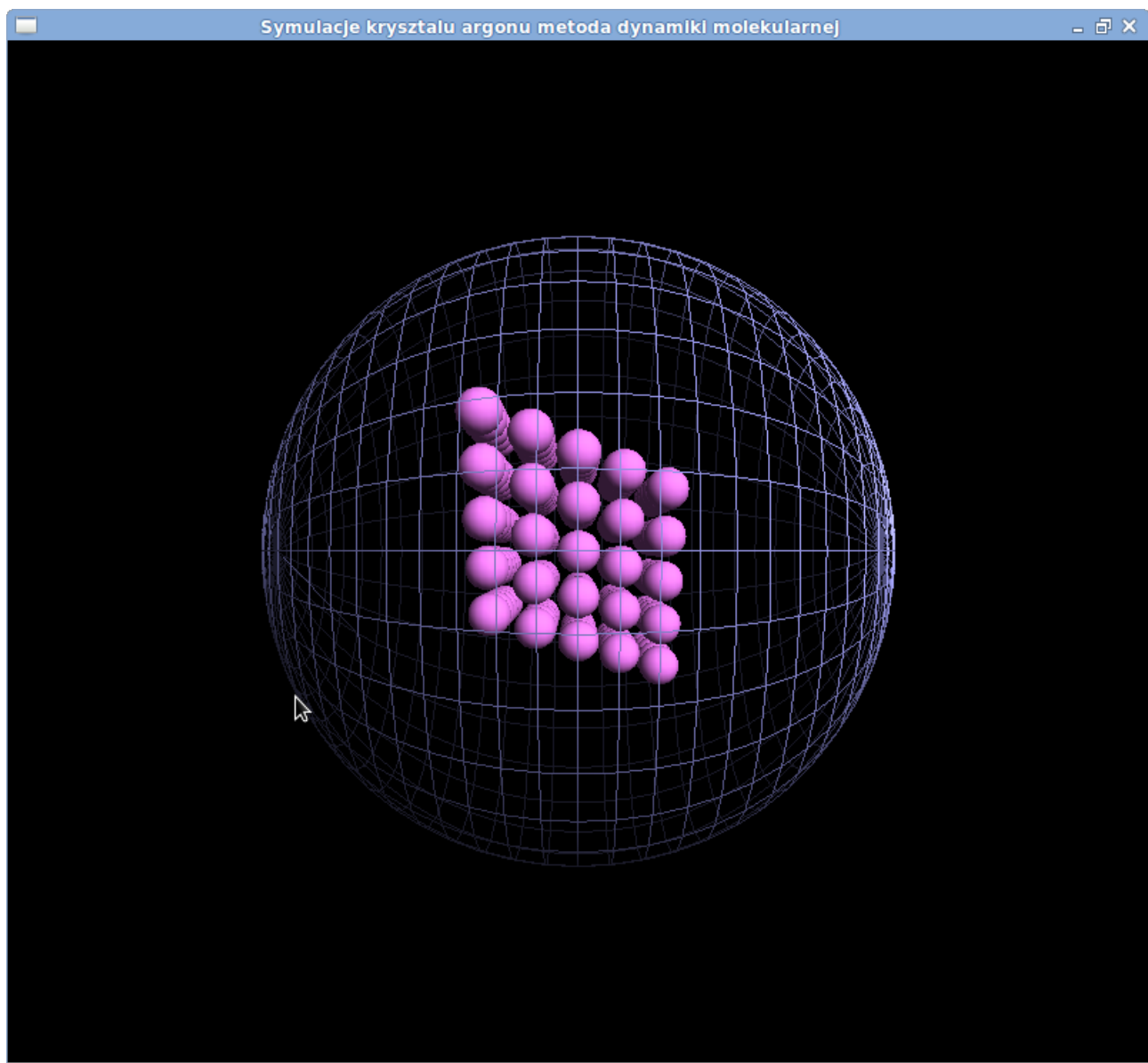
Zależność początkowej energii potencjalnej od stałej sieciowej - $V(a)$

Następnie wykonano symulację kryształu argonu o temperaturze początkowej $T_0=0$. Pozostałe parametry ustalono $a=5$ oraz $L=2,3$. Średnia temperatura okazała się różna od zera i wyniosła $T_{sr}=0,133$, co spowodowane jest wzajemnymi oddziaływaniami atomów. W trakcie symulacji kryształ jednak zachowywał swoją strukturę. Poniżej zestaw podstawowych wykresów tej symulacji.



$H(t)$ dla symulacji kryształu argonu

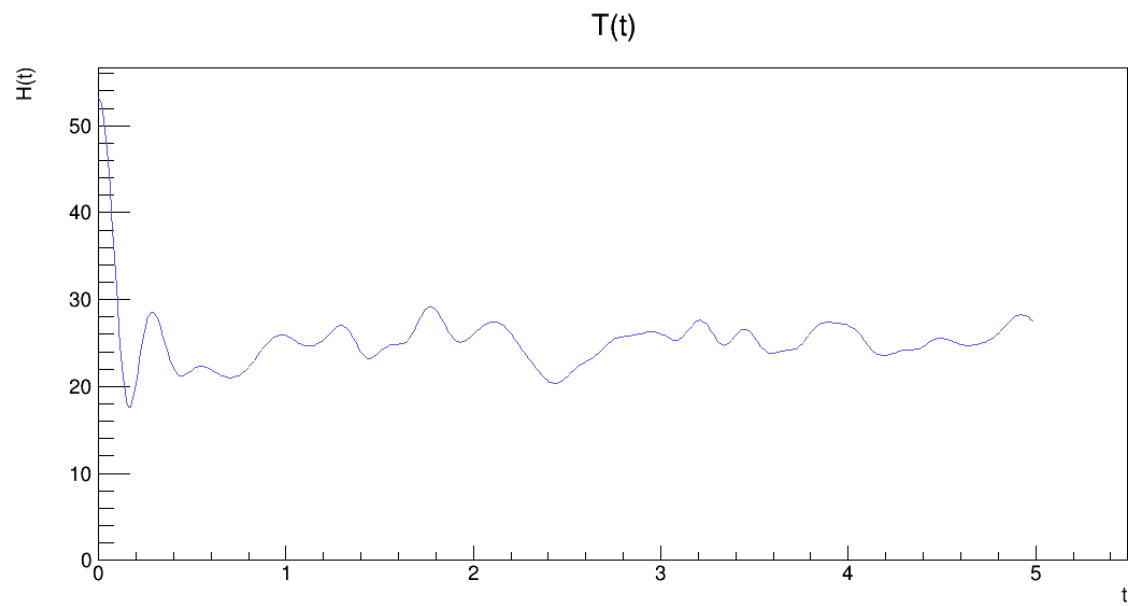




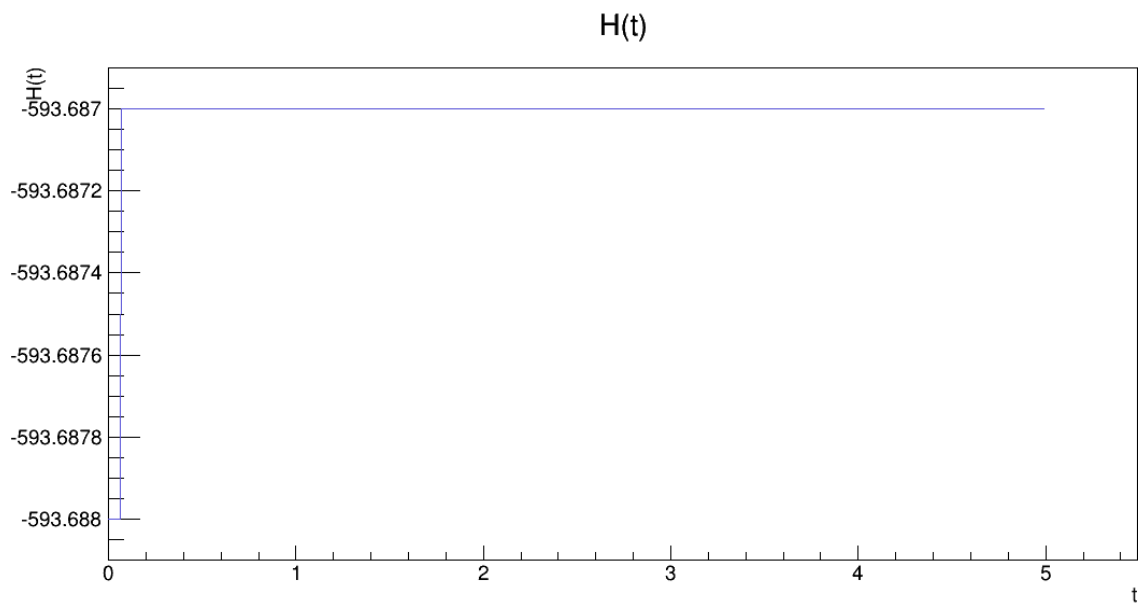
Kolejnym krokiem było badanie temperatury topnienia kryształu. W tym celu wykonano serię symulacji z temperaturą początkową T_0 z zakresu 50 do 300. Na wykresach temperaturowych można zauważyć, że układ termalizuje po czasie około $t=2$. Od tego też momentu zaczynano obliczenia temperatury średniej.

Symulacja dla $T_0=50$

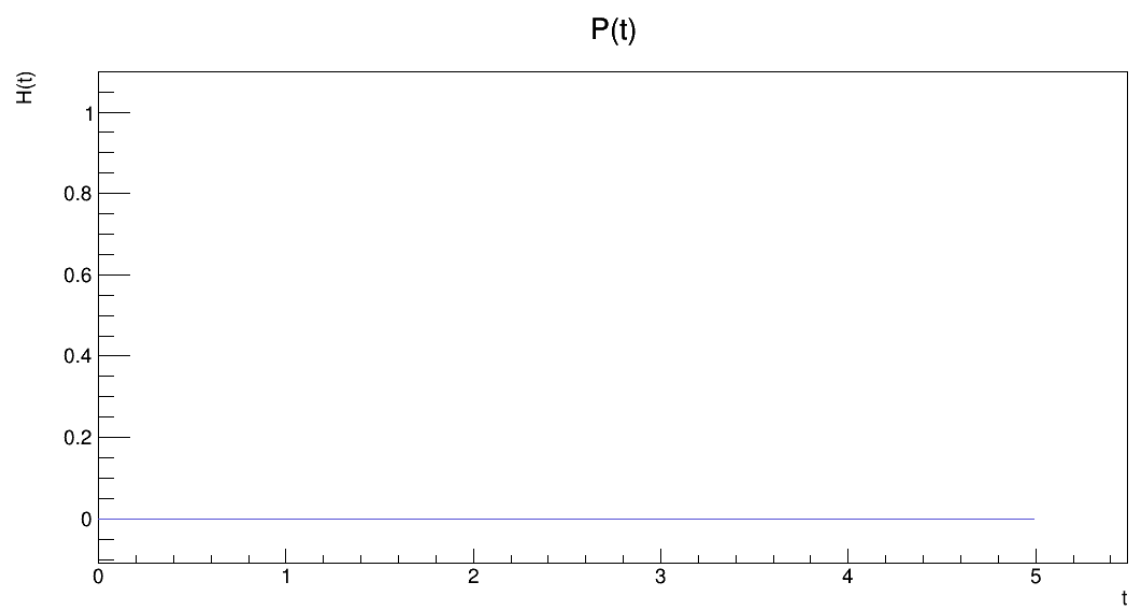
- $T_{\dot{S}R}=25,2$
- $H_{\dot{S}R}=-593,7$
- $P_{\dot{S}R}=0$



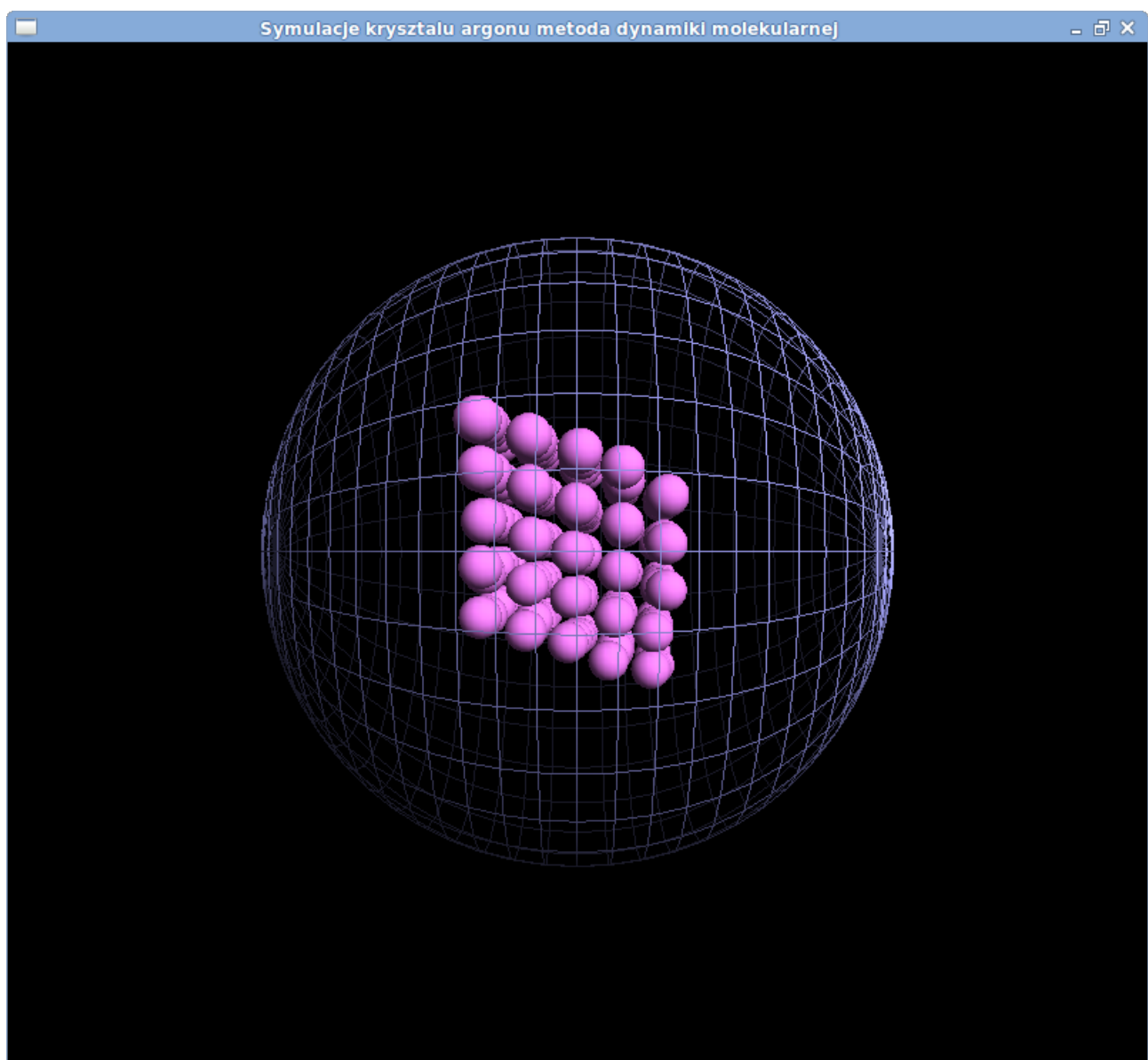
$T(t)$ dla $T_0=50$



$H(t)$ dla $T_0=50$



$P(t)$ dla $T_0=50$

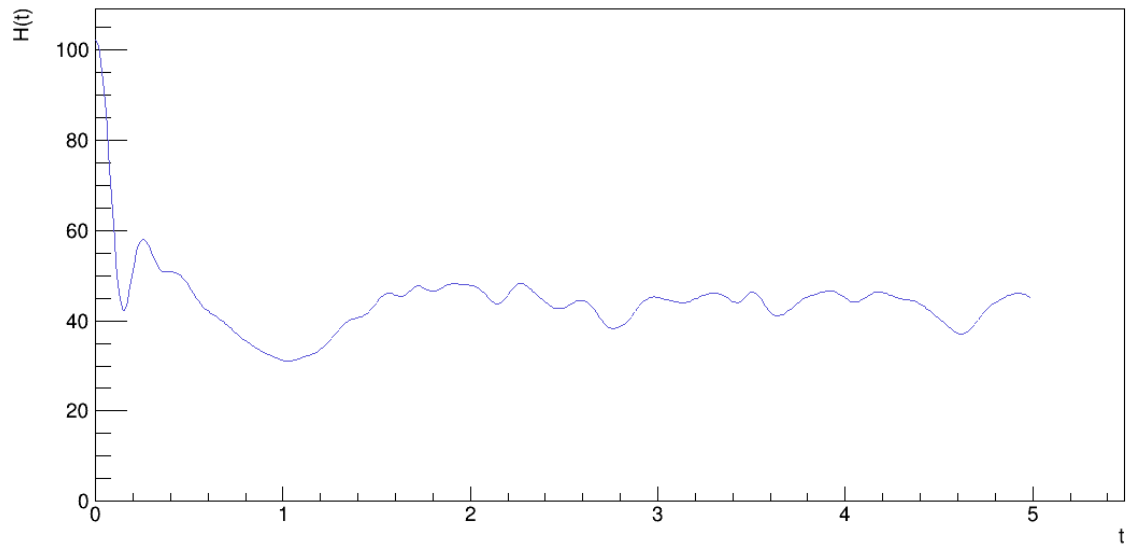


Animacja dla $T_0=50$

Symulacja dla $T_0=100$

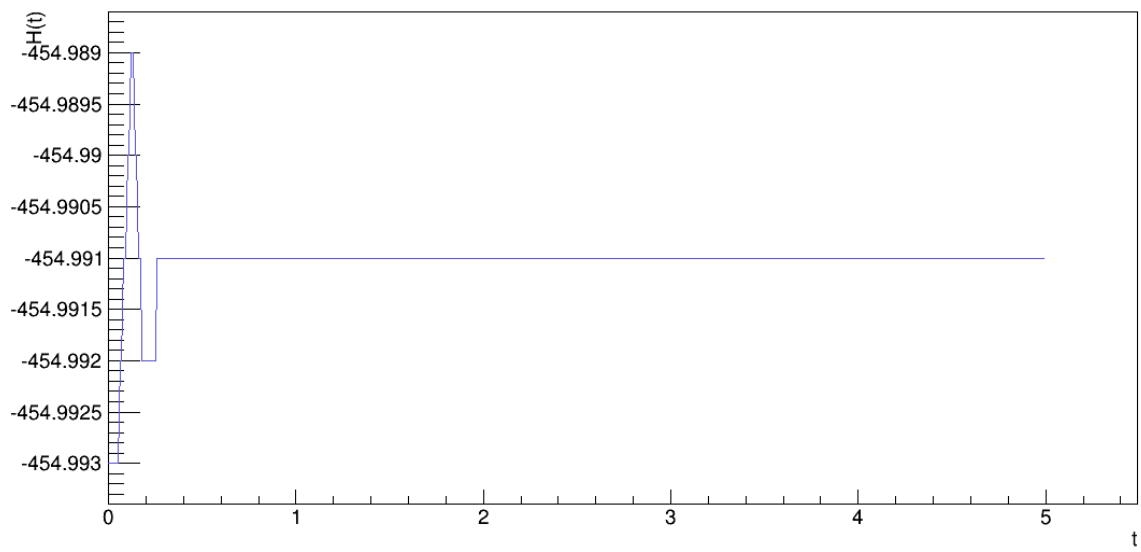
- $T_{\text{SR}}=43,9$
- $H_{\text{SR}}=-517,5$
- $P_{\text{SR}}=0$

$T(t)$

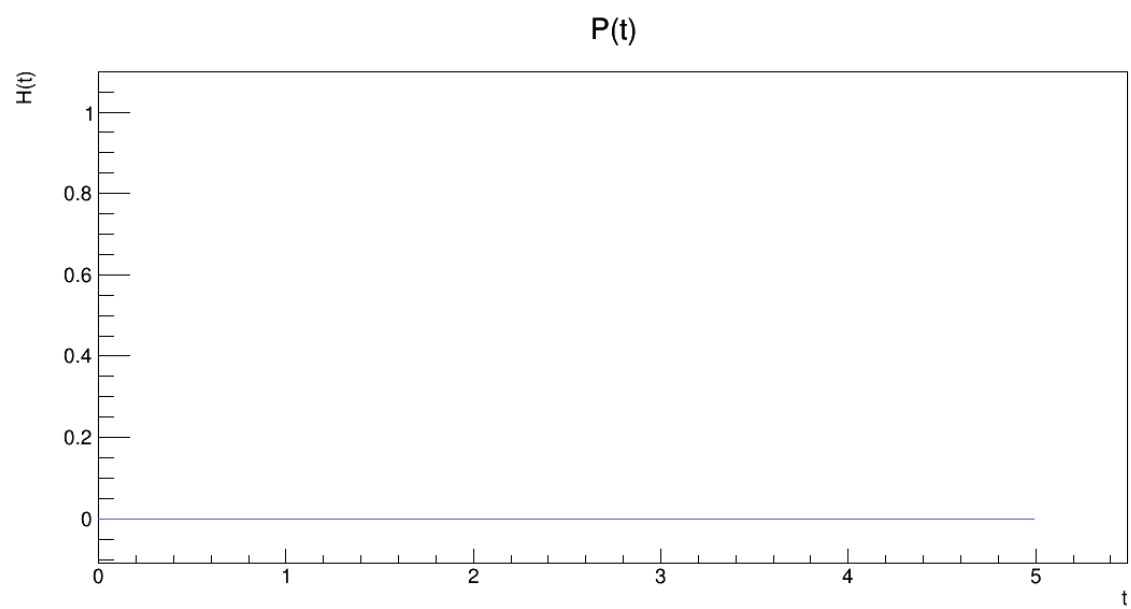


$T(t)$ dla $T_0=100$

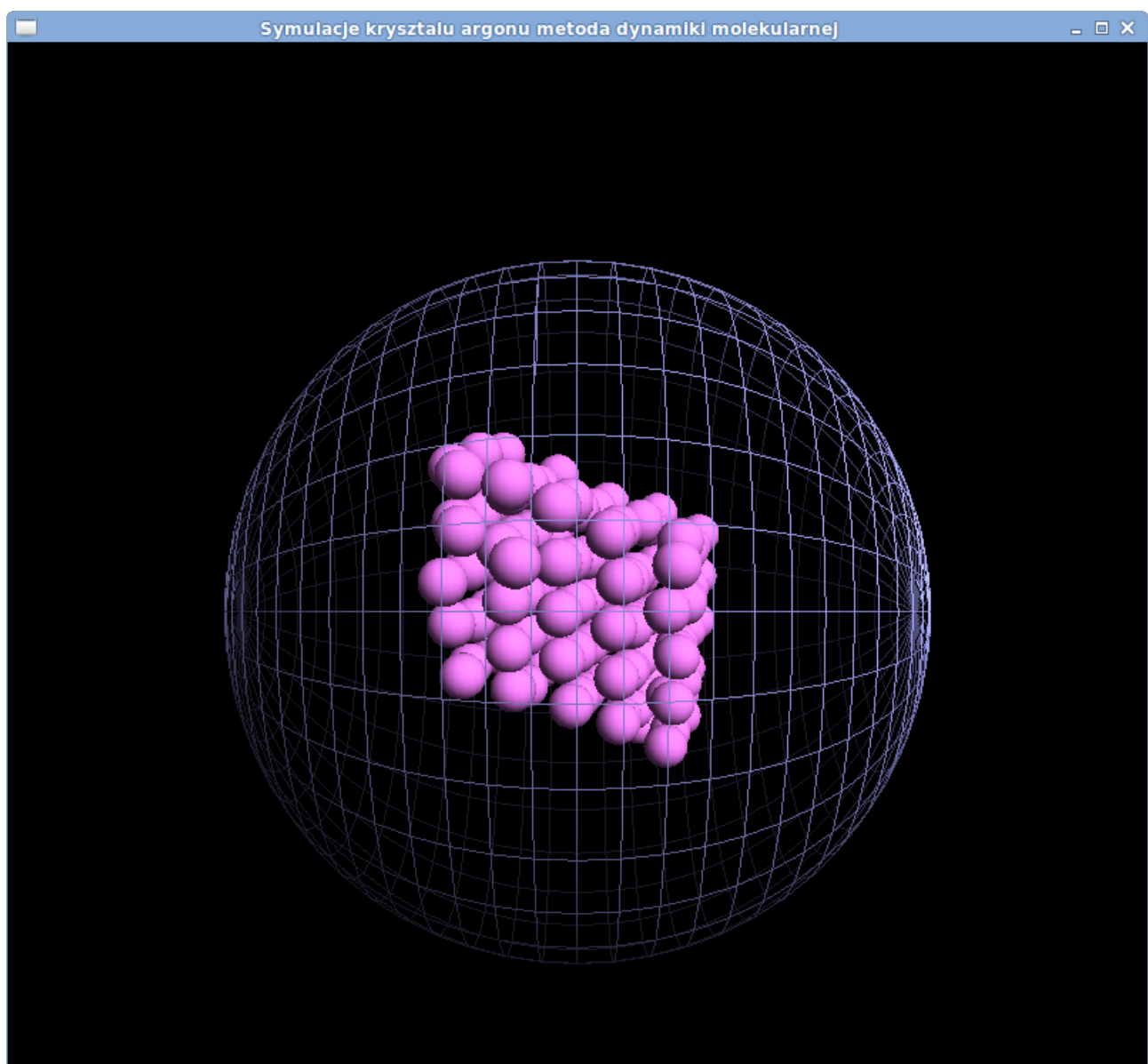
$H(t)$



$H(t)$ dla $T_0=100$



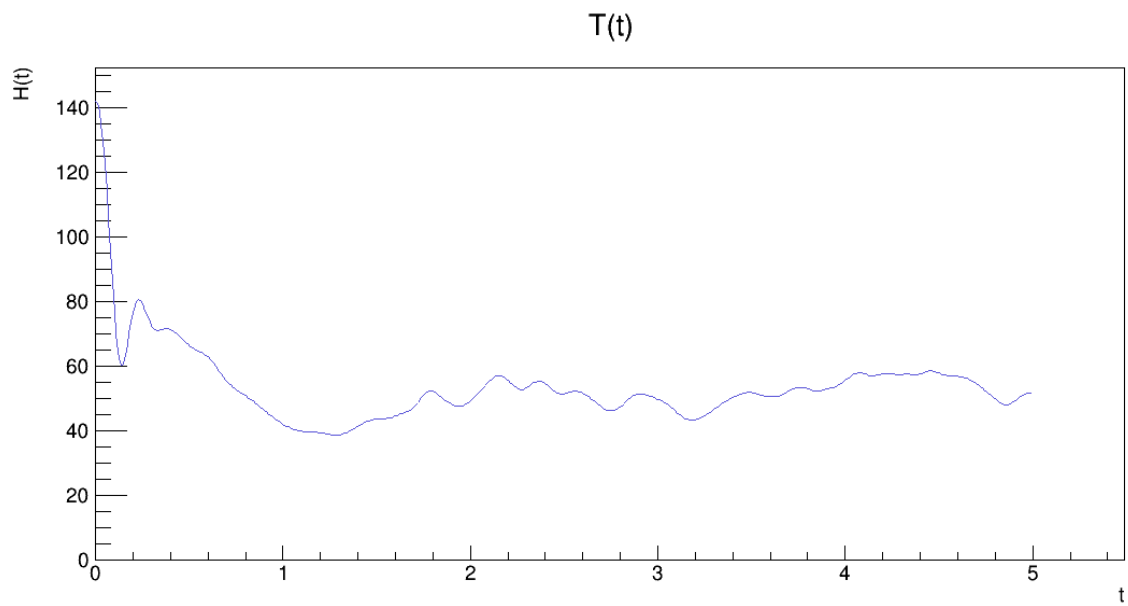
$P(t)$ dla $T_0=100$



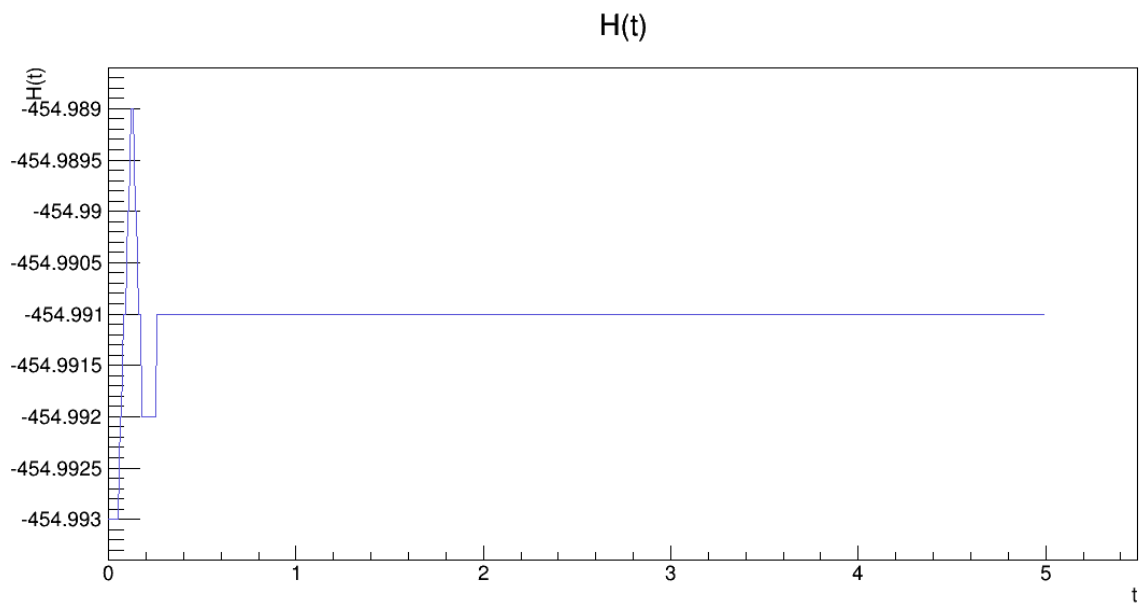
Animacja dla $T_0=100$

Symulacja dla $T_0=150$

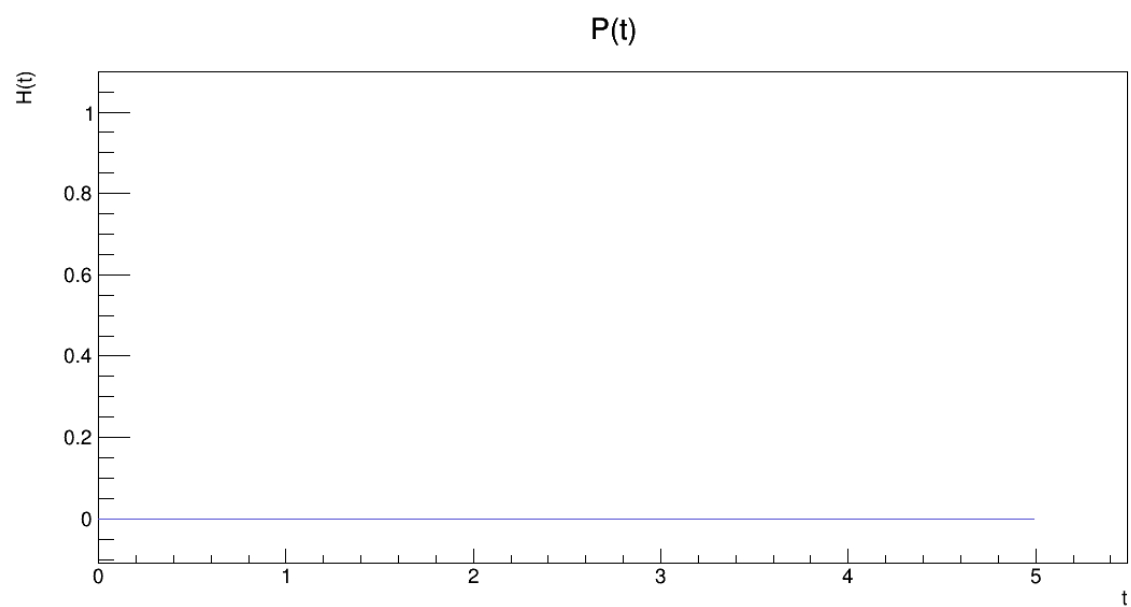
- $T_{SR}=52,4$
- $H_{SR}=-455,0$
- $P_{SR}=0$



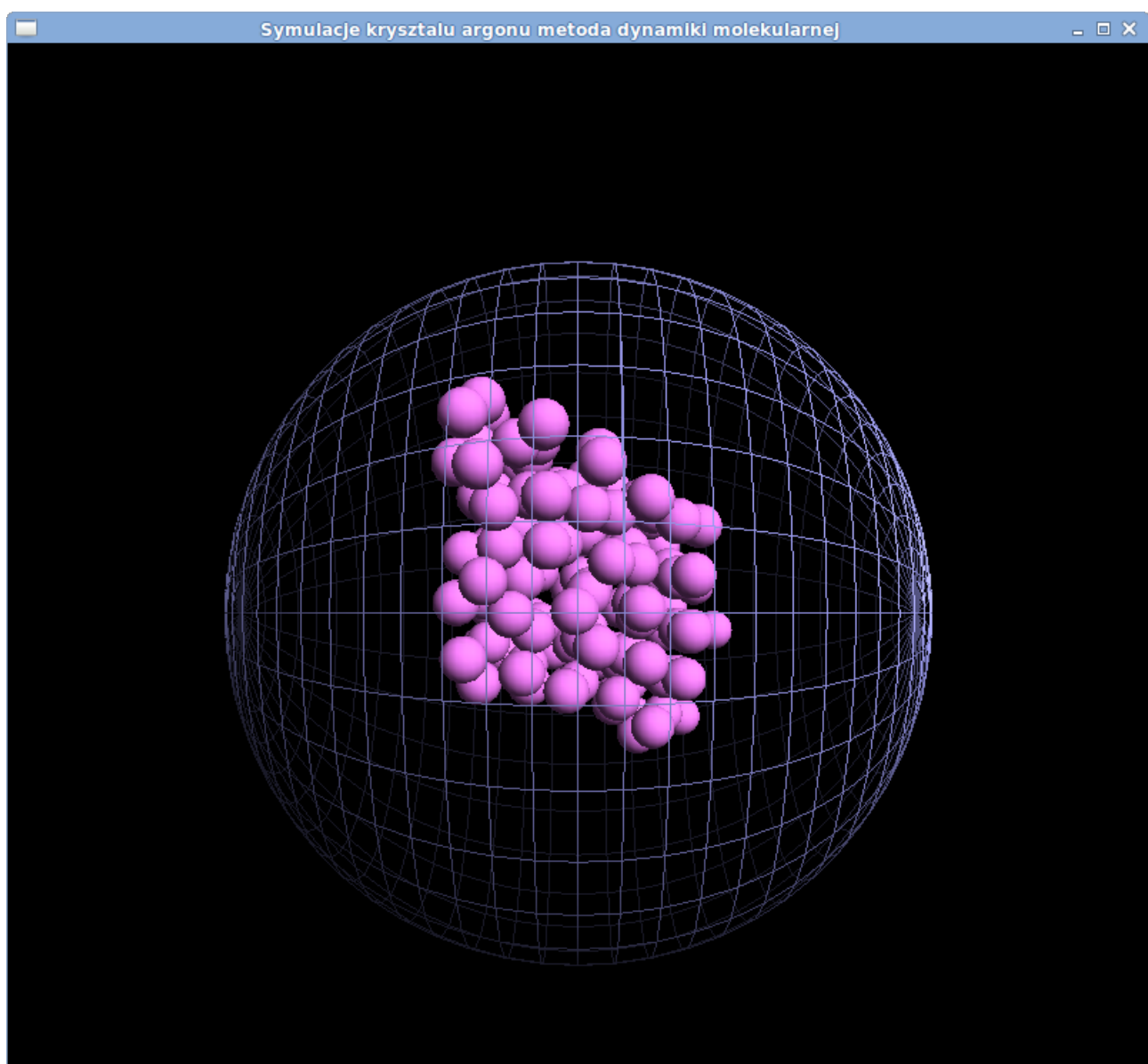
$T(t)$ dla $T_0=150$



$H(t)$ dla $T_0=150$



$P(t)$ dla $T_0=150$

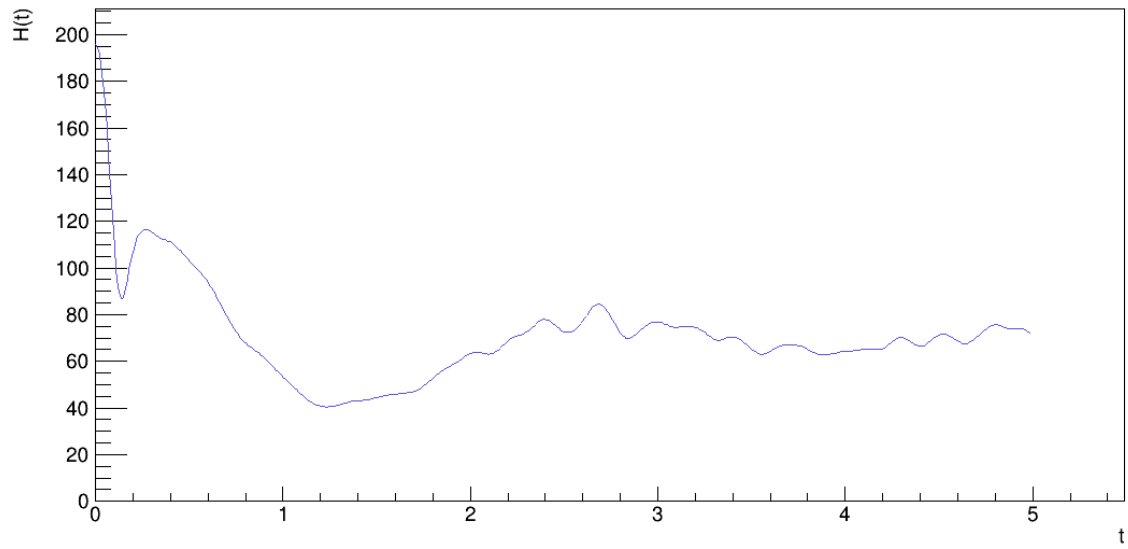


Animacja dla $T_0=150$

Symulacja dla $T_0=200$

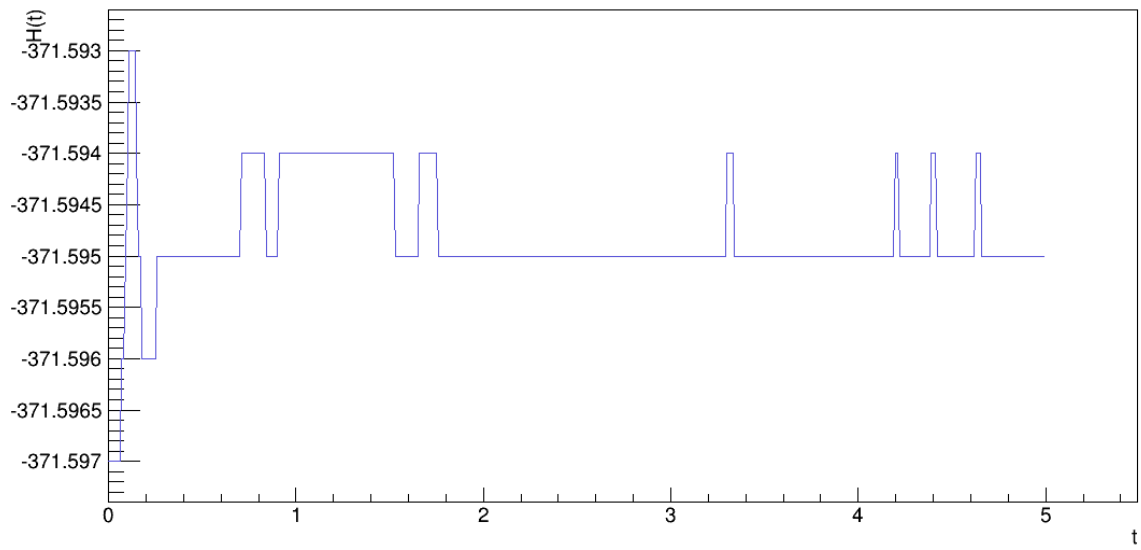
- $T_{\dot{S}R}=70,4$
- $H_{\dot{S}R}=-371,6$
- $P_{\dot{S}R}=0$

$T(t)$

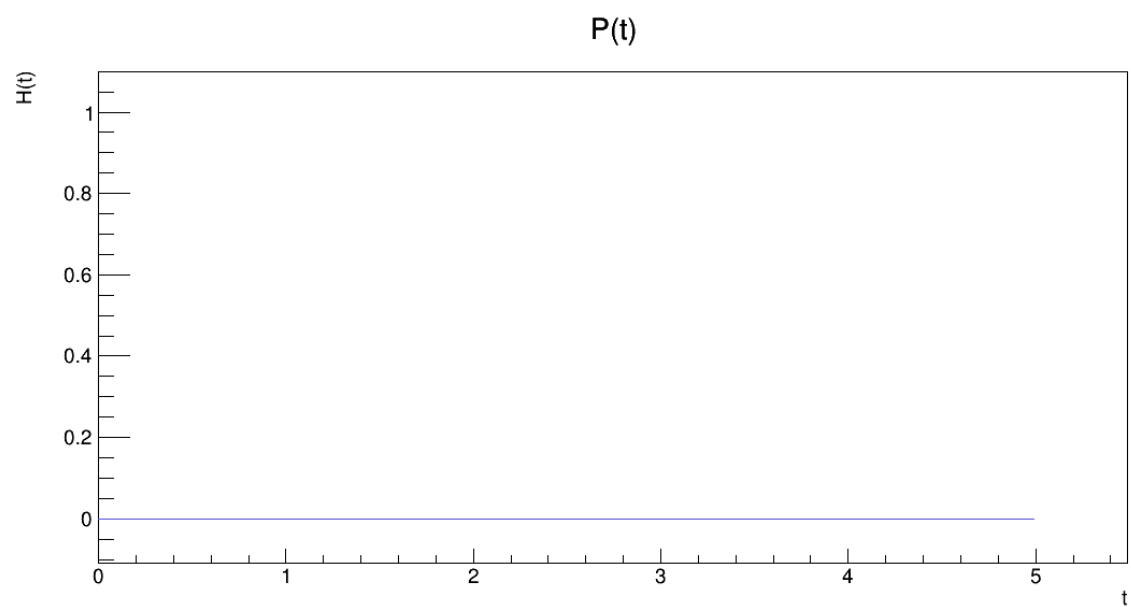


$T(t)$ dla $T_0=200$

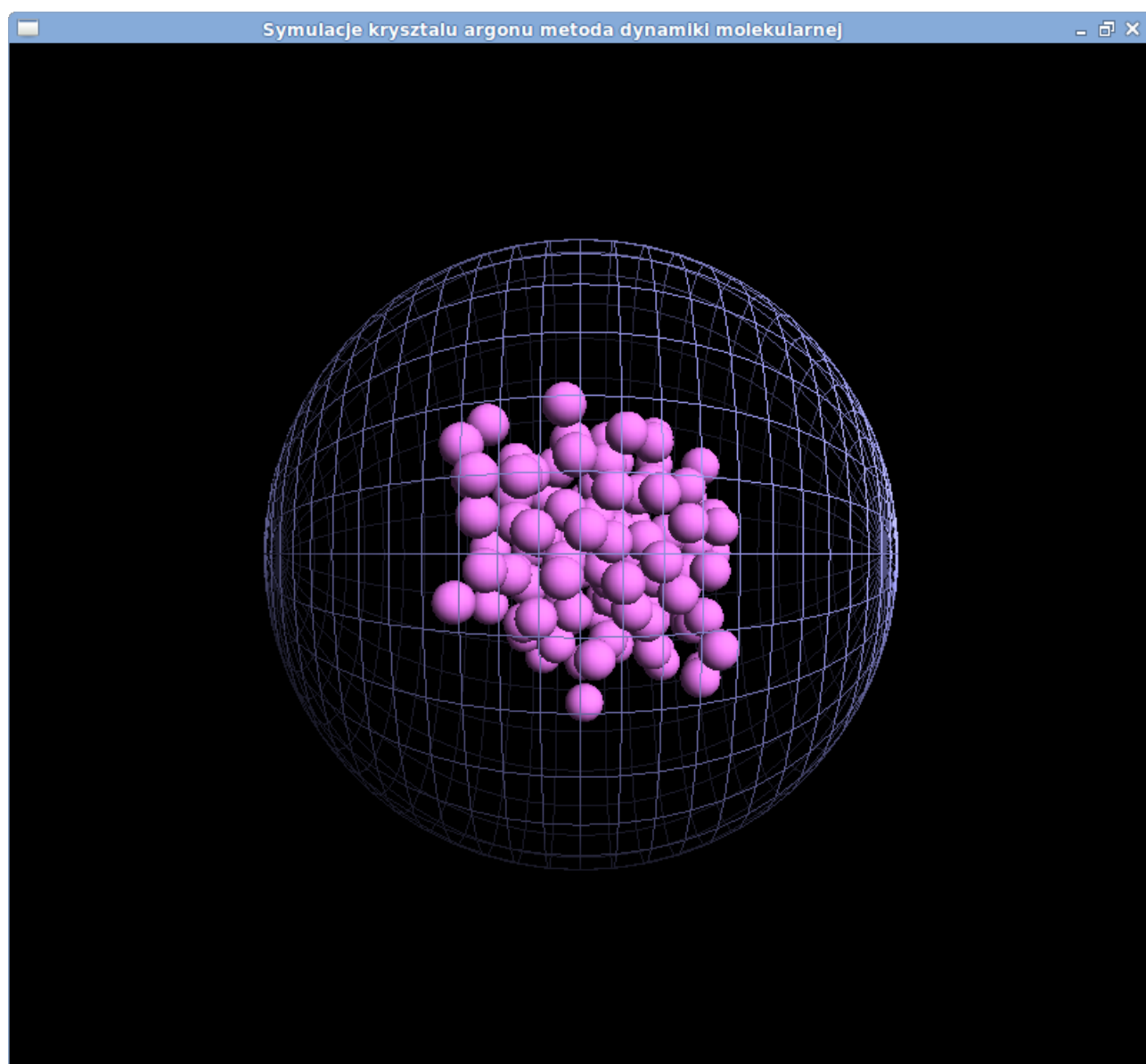
$H(t)$



$H(t)$ dla $T_0=200$



$P(t)$ dla $T_0=200$

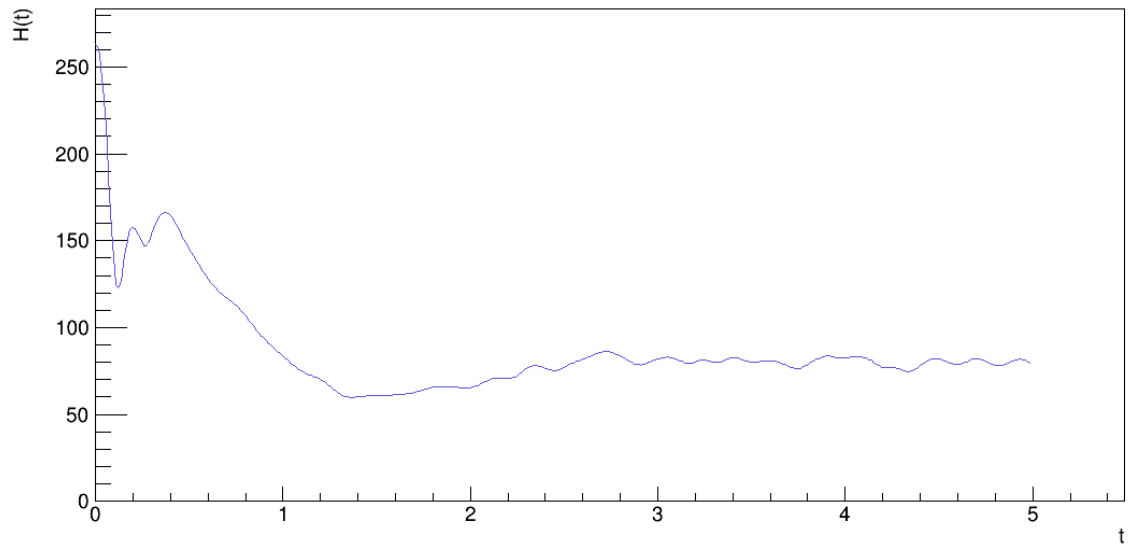


Animacja dla $T_0=200$

Symulacja dla $T_0=250$

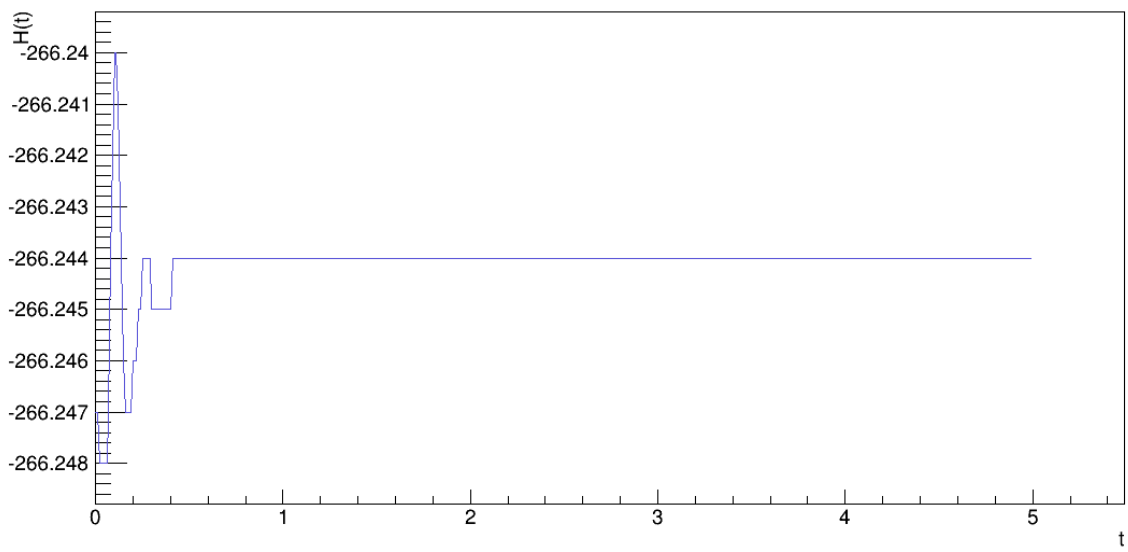
- $T_{\dot{S}R}=79,3$
- $H_{\dot{S}R}=-266,2$
- $P_{\dot{S}R}=0,29$

$T(t)$

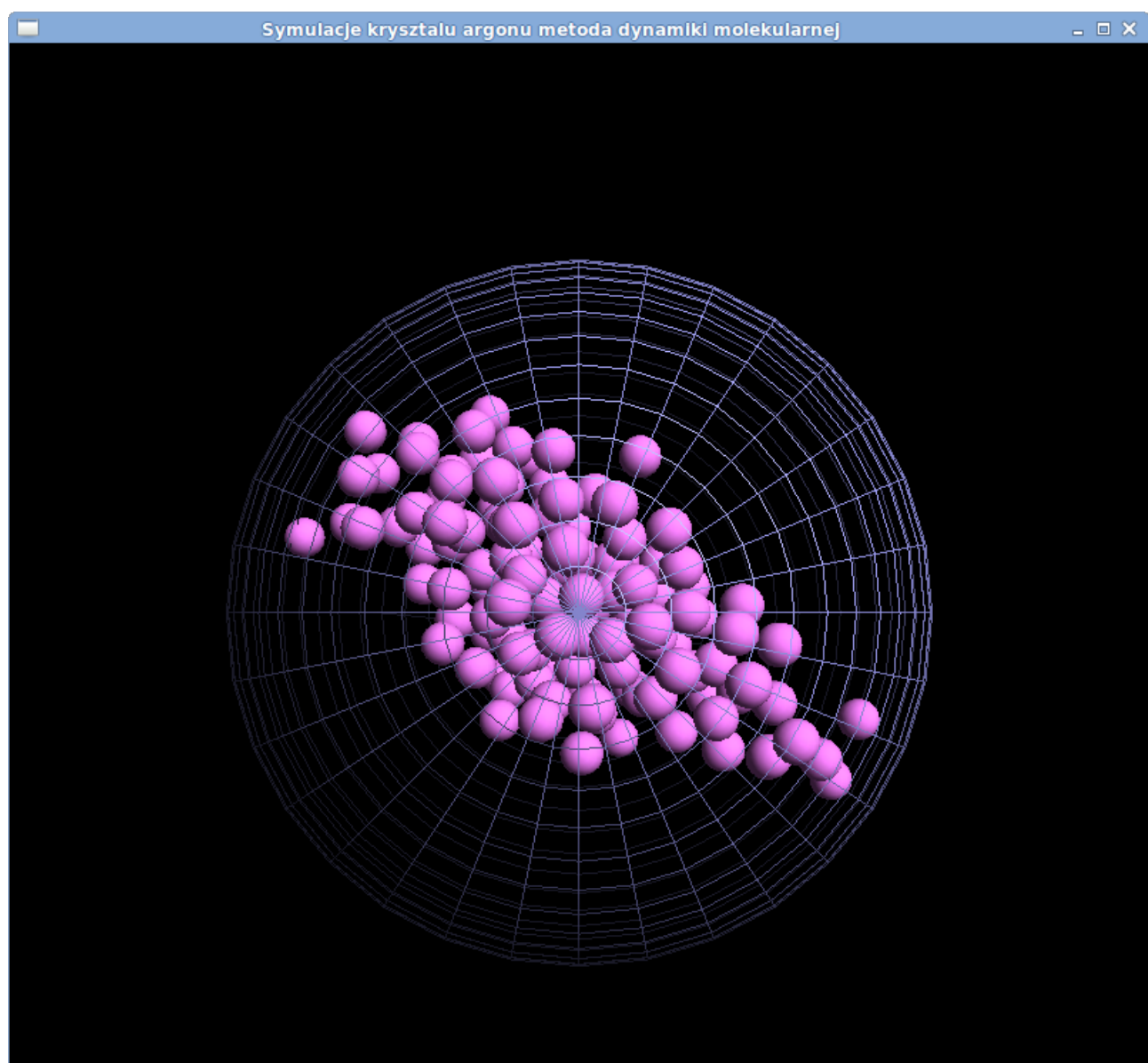
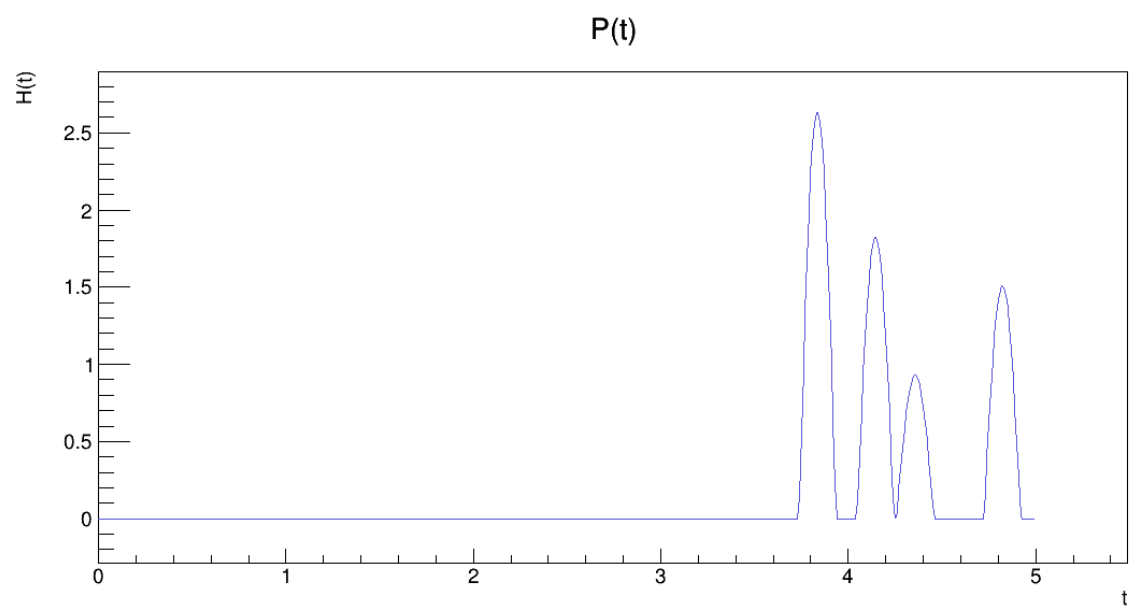


$T(t)$ dla $T_0=250$

$H(t)$



$H(t)$ dla $T_0=250$

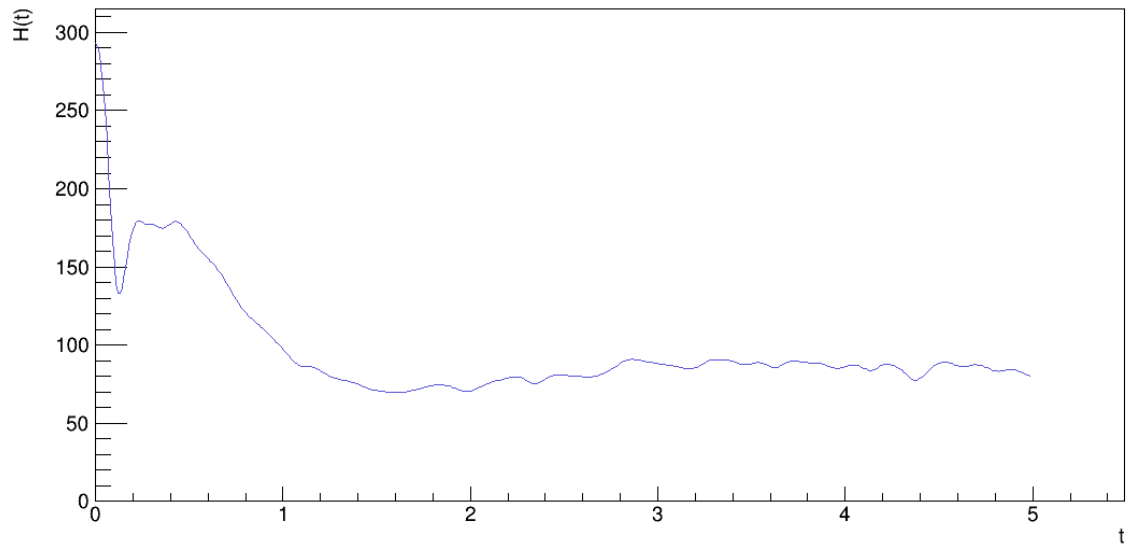


Animacja dla $T_0=250$

Symulacja dla $T_0=300$

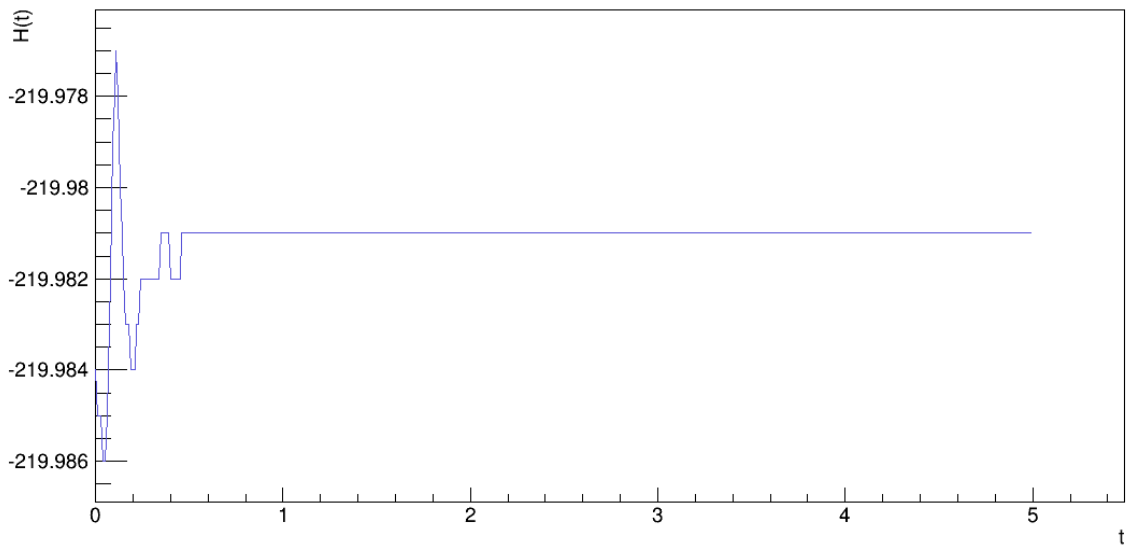
- $T_{\dot{S}R}=84,5$
- $H_{\dot{S}R}=-220,0$
- $P_{\dot{S}R}=0,5$

$T(t)$

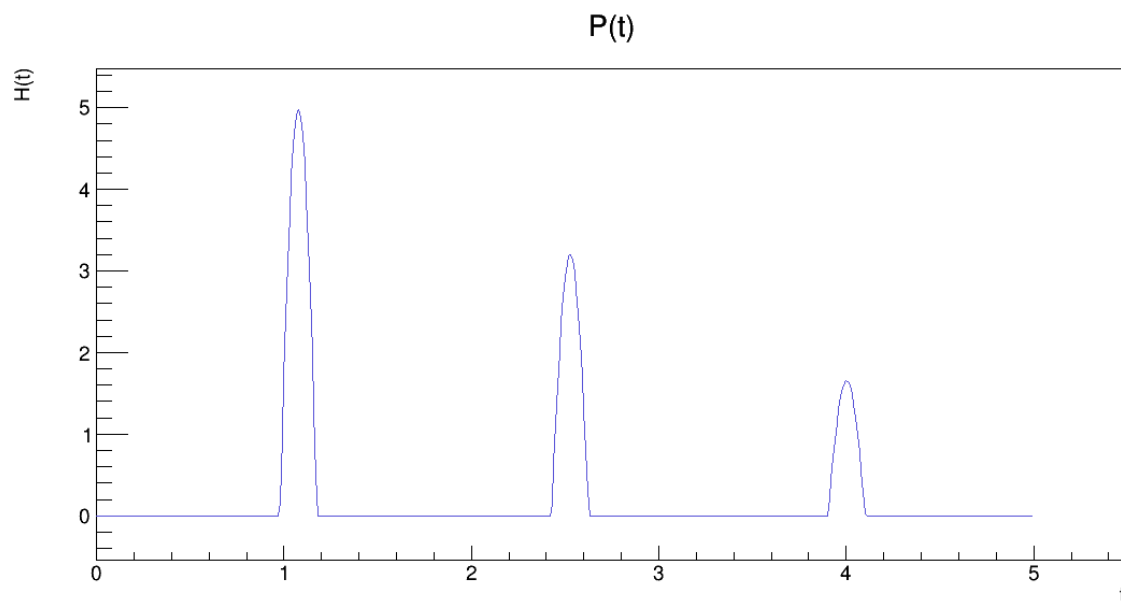


$T(t)$ dla $T_0=300$

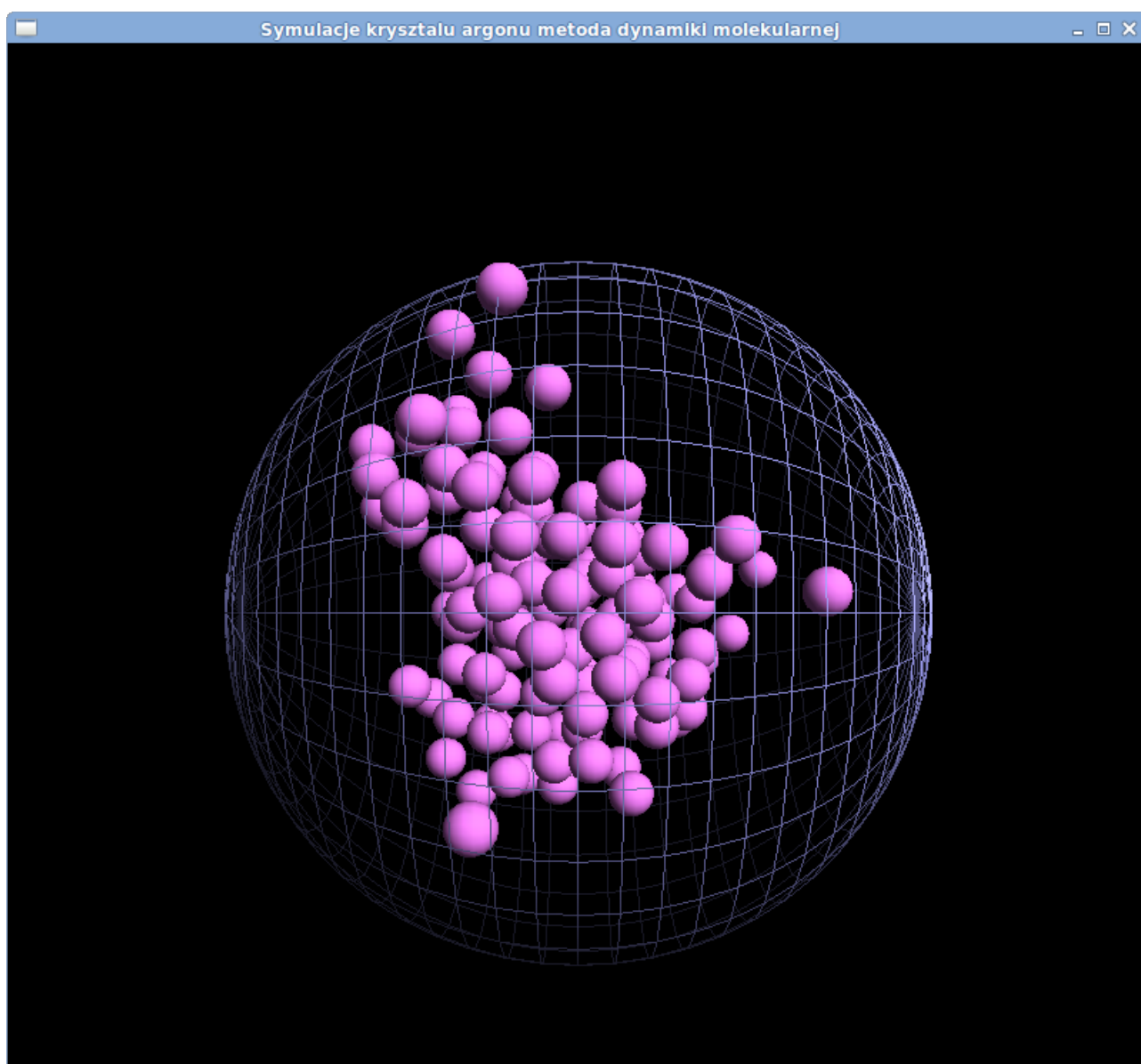
$H(t)$



$H(t)$ dla $T_0=300$



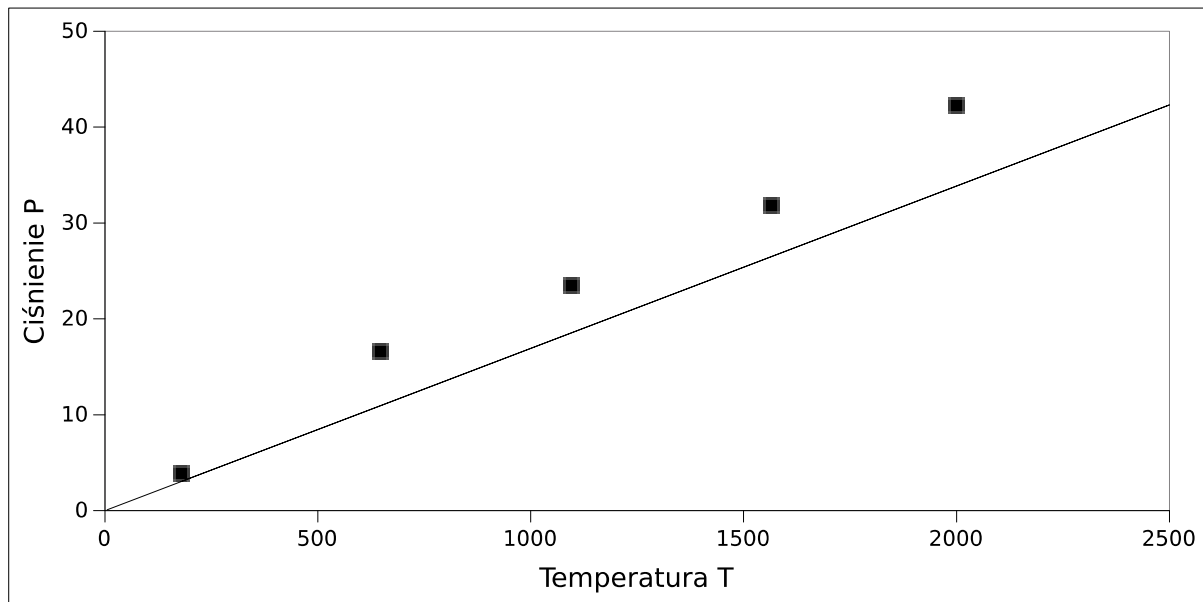
$P(t)$ dla $T_0=300$



Animacja dla $T_0=300$

Rosnące wraz z temperaturą nieuporządkowanie struktury oraz pojawienie się ciśnienia na ściankach naczynia sferycznego świadczą o tym, że osiągnięty został stan gazowy. Jeśli przyjąć takie kryterium, to można oszacować, że temperatura topnienia wynosi około 70, bo przy takiej właśnie średniej temperaturze po raz pierwszy pojawiło się ciśnienie na ściankach. Wartość tablicowa to 83,8 K, co dość dobrze odpowiada naszemu prostemu modelowi.

Ostatnim elementem ćwiczenia było zbadanie zależności średniego ciśnienia od temperatury i porównanie go z równaniem stanu gazu doskonałego. Wykonano 5 symulacji z temperaturą początkową z zakresu od 500 do 2500. Porównanie tych pięciu punktów na wykresie fazowym z krzywą dla gazu doskonałego widnieje poniżej.



Wnioski:

- Program prawidłowo realizuje symulację dynamiki atomów argonu w stanie krystalicznym oraz gazowym.
- Zgodnie z teorią układ po pewnym czasie termalizuje się; energia kinetyczna oraz potencjalna fluktuuje wokół pewnej wartości średniej.
- Algorytm traci stabilność dla kroku czasowego 0,01 i niższych.
- Początkowa energia potencjalna dla układu 125 atomów jest najmniejsza przy $a=0,37317$.
- W wyniku wzajemnego oddziaływania atomów, a także oddziaływań ze ścianą naczynia przy temperaturze początkowej $T_0=0$ temperatura średnia jest większa od zera.
- Zależność $P_{SR}(T_{SR})$ w przybliżeniu zgadza się z teoretyczną zależnością ciśnienia od temperatury dla gazu doskonałego