

Symulacje kryształu argonu - metoda dynamiki molekularnej

Robert Jankowski

4 listopada 2019

Komputerowe Metody Symulacji - laboratorium

I. WSTĘP

Celem projektu było zaimplementowanie symulacji dynamiki molekularnej oraz wykonaniu kilku eksperymentów dla układu atomów jednego rodzaju oddziaływujących siłami van der Waalsa.

II. IMPLEMENTACJA

Program do symulacji został napisany w Javie (wersja 11). Do wizualizacji wykorzystano bibliotekę JOGL [1]. Wykresy zostały opracowane w pakiecie R.

III. WYNIKI

A. 5.1 Test programu

Wyznaczenie odpowiedniego kroku czasowego τ przy którym symulacji jest stabilna. Dla każdej z 20 symulacji obliczono średnią wartość hamiltonianu, ciśnienia oraz temperatury dla każdego z τ . Ziarno losowe jest stałe, dlatego na wykresach jest widoczny jeden punkt dla danego τ .

Fig. 1. Zależność średniego hamiltonianu od τ

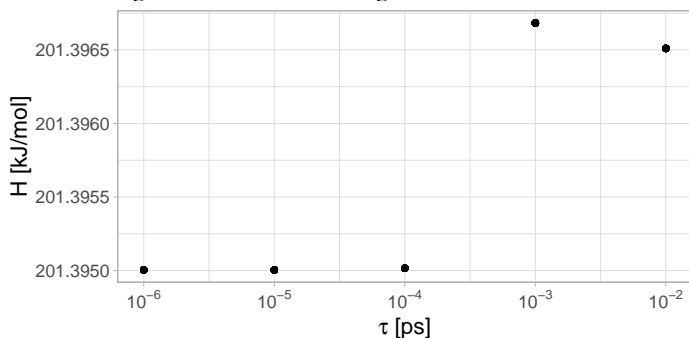


Fig. 2. Zależność średniego ciśnienia od τ

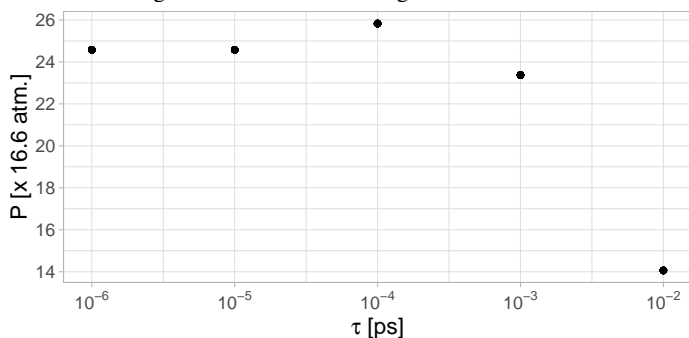


Fig. 3. Zależność średniej temperatury od τ

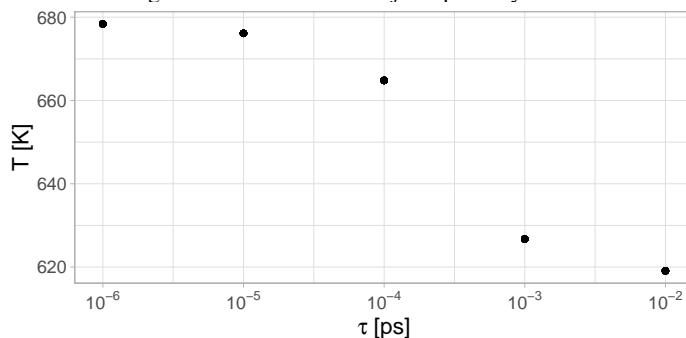


Fig. 4. Porównanie zależności chwilowego hamiltonianu od czasu dla wybranych wartości τ

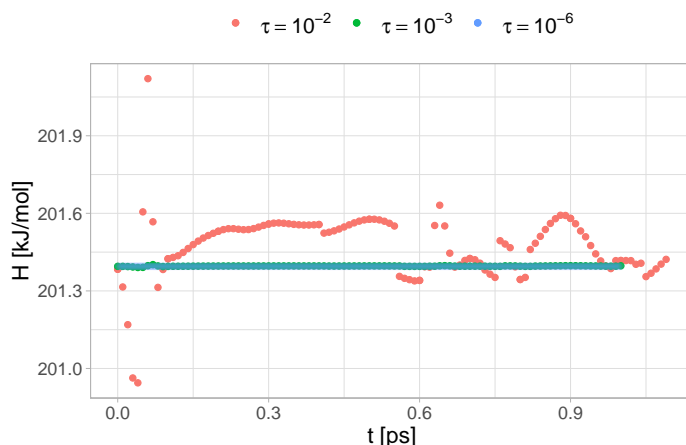


Fig. 5. Porównanie zależności chwilowego ciśnienia od czasu dla wybranych wartości τ

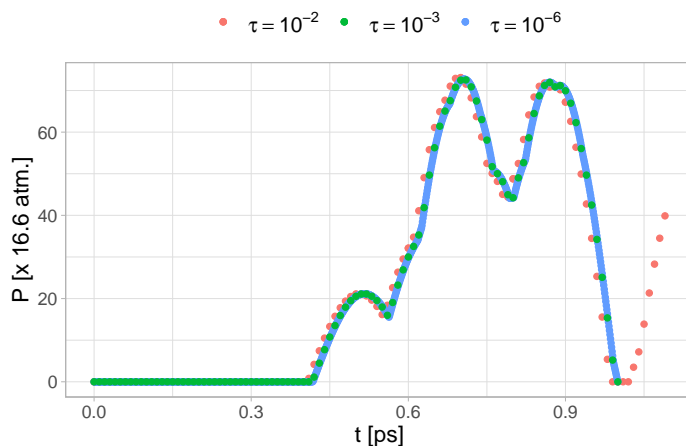
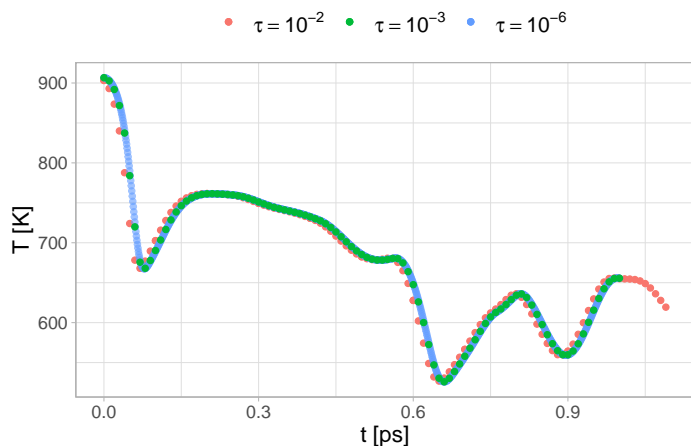


Fig. 6. Porównanie zależności chwilowej temperatury od czasu dla wybranych wartości τ



Na podstawie przeprowadzonych symulacji przyjęto $\tau = 10^{-3} ps$.

B. 5.2 Kryształ

Wyznaczenie wartości a (odległość między kolejnymi atomami) dla której energia potencjalna jest minimalna. Minimum $V = -676,41 kJ/mol$ dla $a = 0,375 nm$.

Fig. 7. Zależność energii potencjalnej od a

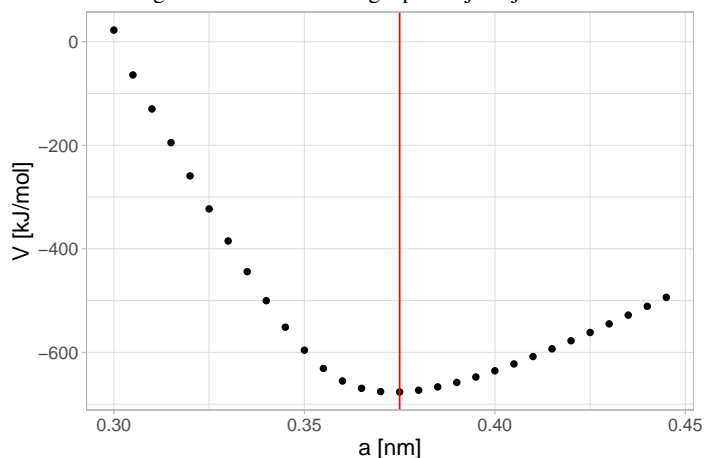
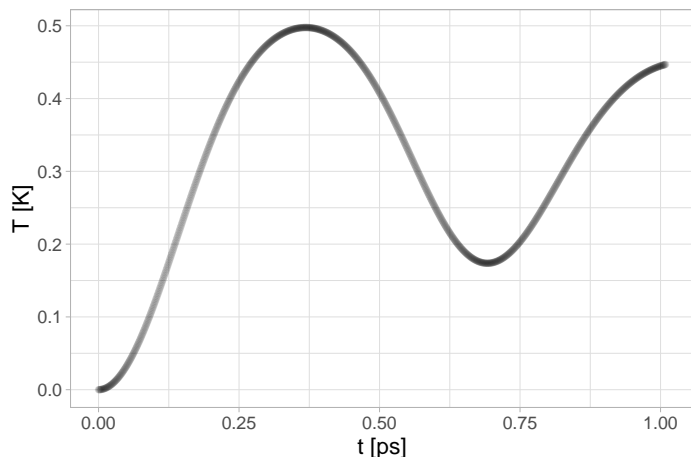


Fig. 8. Zależność temperatury chwilowej od czasu dla $a = 0,375 nm$



W celu przetestowania stabilności kryształu wykonano wykres chwilowej temperatury od czasu dla wyznaczonej wartości a .

C. 5.3 Topnienie kryształu

Oszacowanie temperatury topnienia przy pomocy obserwacji symulacji w środowisku graficznym.

Fig. 9. Zależność temperatury chwilowej od czasu dla wybranych wartości T_0

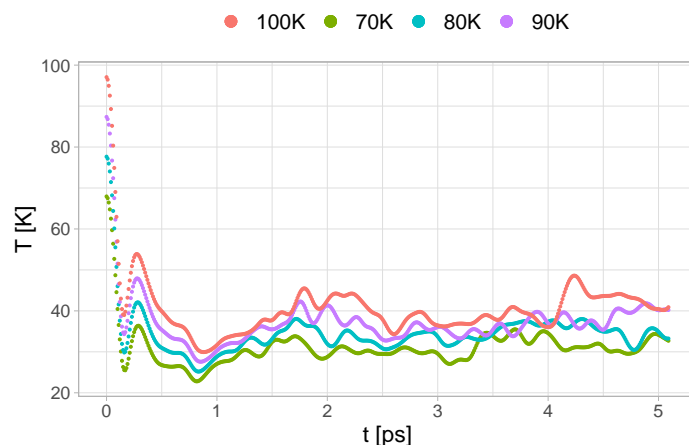
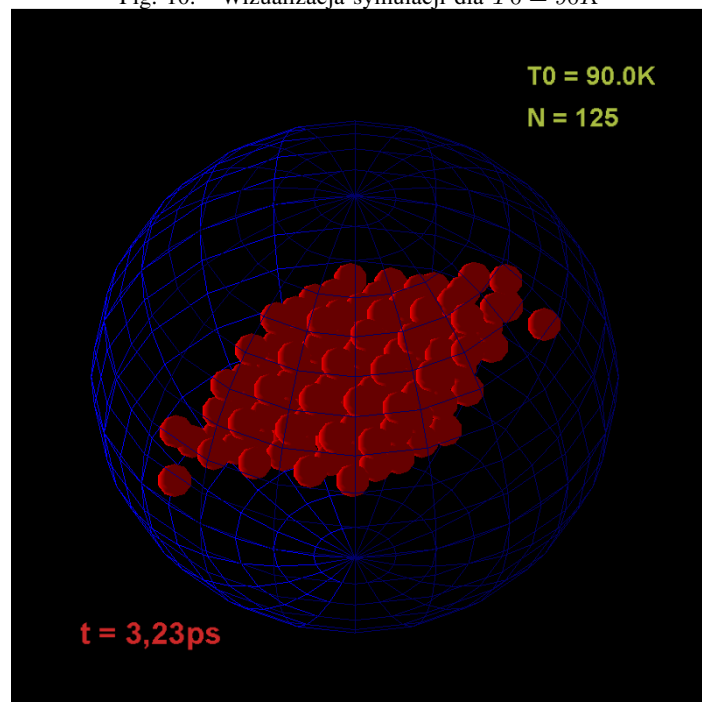


Fig. 10. Wizualizacja symulacji dla $T_0 = 90K$



Po porównaniu kilku temperatur początkowych stwierdzono, że kryształ topnieje w około $90K$. Dokładniejszy pomiar nie jest możliwy z powodu trudności porównania wizualnej symulacji.

D. 5.4 Gaz

Określenie minimalnego czasu dynamiki potrzebnego na stopienie kryształu i termalizację gazu. Wykonano symulację dla liczby kroków termalizacji między 0 a 20000. Następnie wyznaczono wartość $S_0 = 19000$ przy której temperatura się ustabilizowała.

Fig. 11. Zależność średniej temperatury od liczby kroków termalizacji

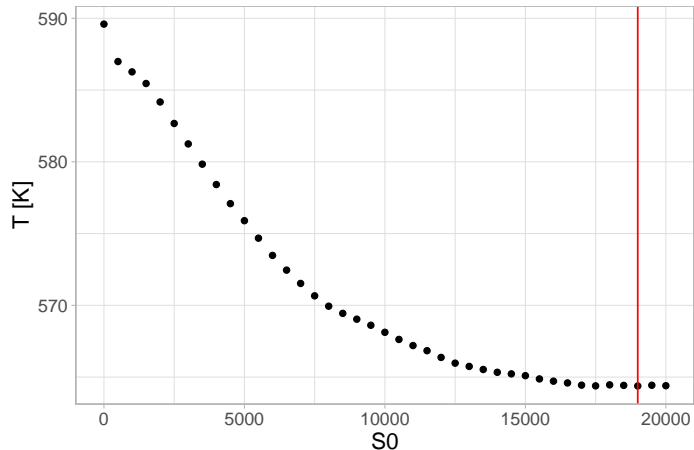


Fig. 12. Zależność średniej temperatury od średniego ciśnienia

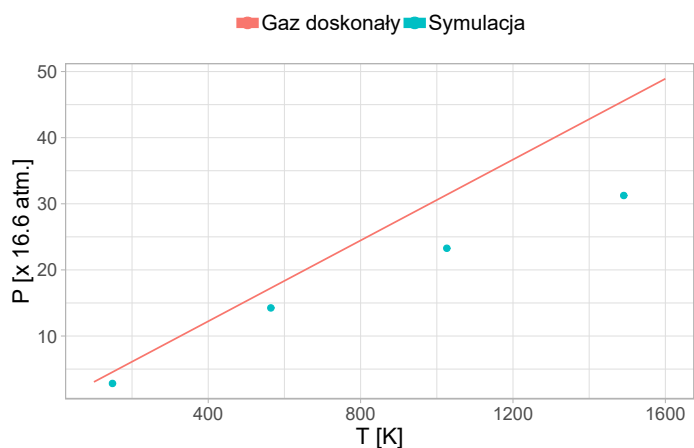


Fig. 13. Zależność średniej temperatury od czasu dla określonych wartości T_0 . Czarna pionowa linia oznacza liczbę kroków termalizacji S_0

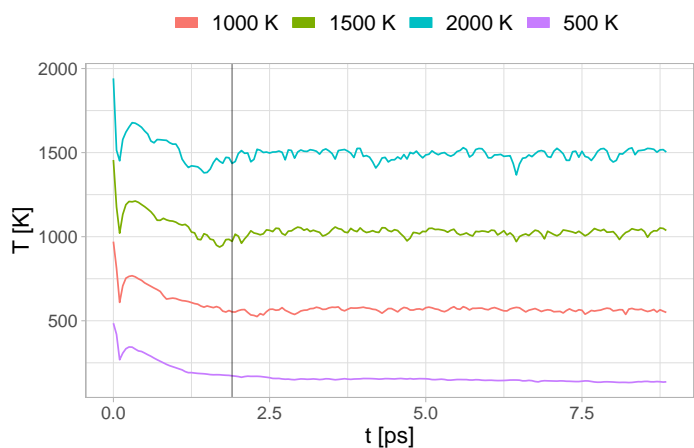
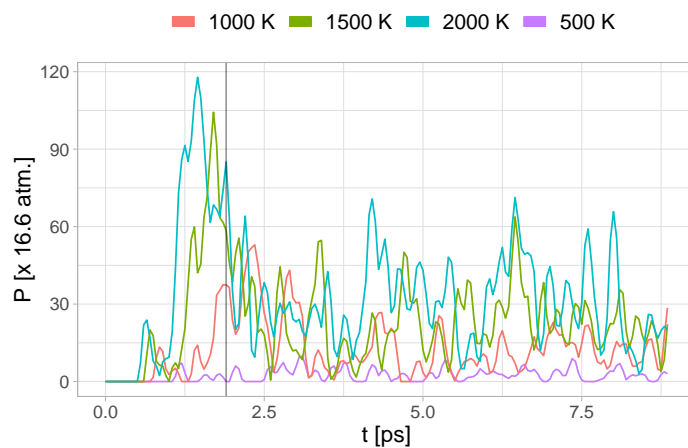


Fig. 14. Zależność średniego ciśnienia od czasu dla określonych wartości T_0 . Czarna pionowa linia oznacza liczbę kroków termalizacji S_0



REFERENCES

- [1] [JOGL - Java Binding for the OpenGL API - JogAmp](#) Data dostępu: 30.10.2019