

# Symulacje kryształu argonu - metoda dynamiki molekularnej

Robert Jankowski

5 listopada 2019

Komputerowe Metody Symulacji - laboratorium

## I. WSTĘP

Celem projektu było zaimplementowanie symulacji dynamiki molekularnej oraz wykonaniu kilku eksperymentów dla układu atomów jednego rodzaju oddziaływających 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  $\tau$  przy którym symulacji jest stabilna. Dla każdej z 20 symulacji obliczono średnią wartość hamiltonianu, ciśnienia oraz temperatury dla każdego z  $\tau$ . Ziarno losowe jest stałe, dlatego na wykresach jest widoczny jeden punkt dla danego  $\tau$ .

Fig. 1. Zależność średniego hamiltonianu od  $\tau$

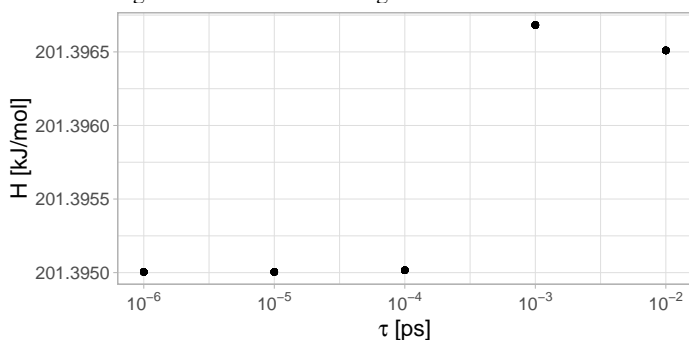


Fig. 2. Zależność średniego ciśnienia od  $\tau$

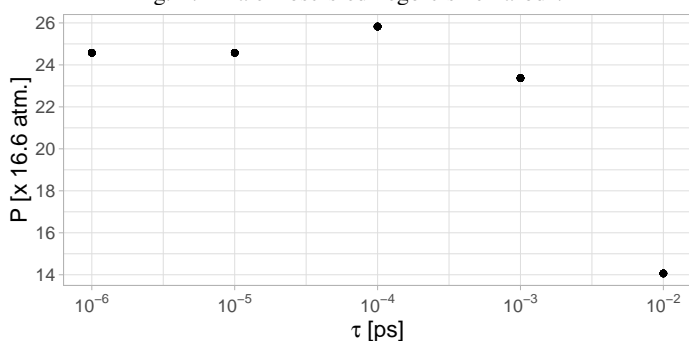


Fig. 3. Zależność średniej temperatury od  $\tau$

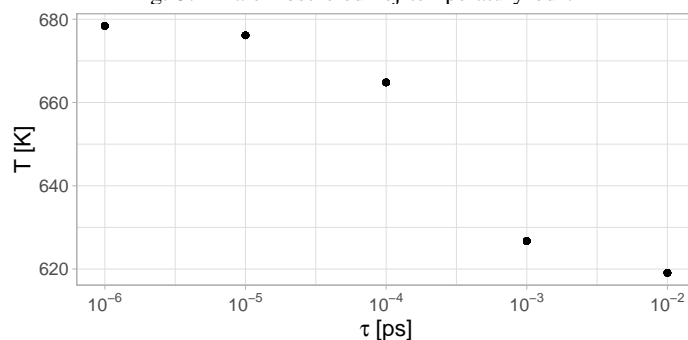


Fig. 4. Porównanie zależności chwilowego hamiltonianu od czasu dla wybranych wartości  $\tau$

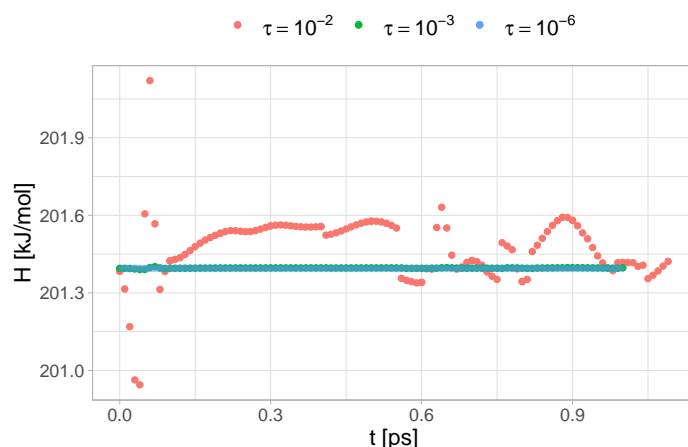


Fig. 5. Porównanie zależności chwilowego ciśnienia od czasu dla wybranych wartości  $\tau$

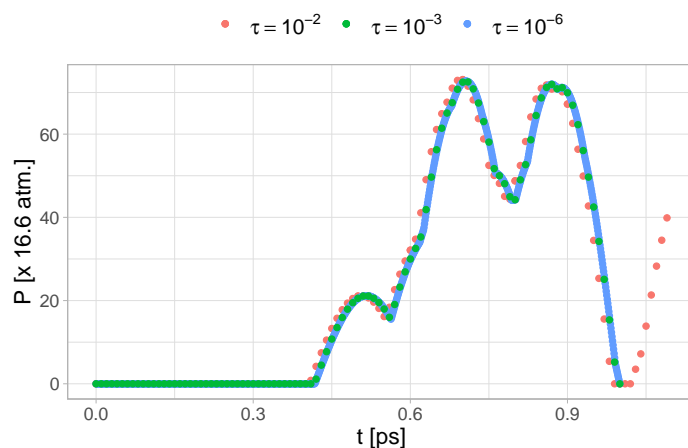
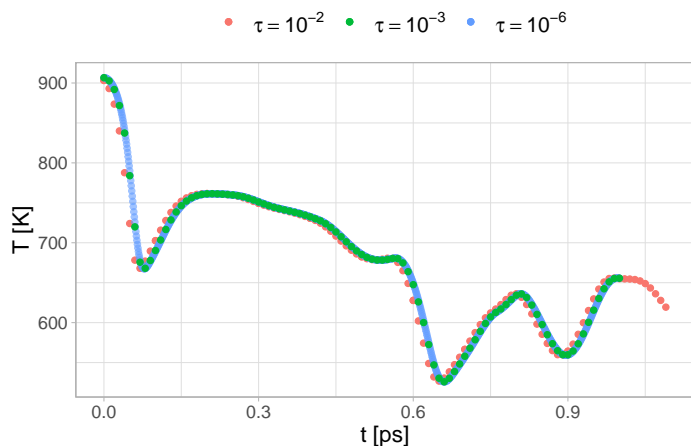


Fig. 6. Porównanie zależności chwilowej temperatury od czasu dla wybranych wartości  $\tau$



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  $a$

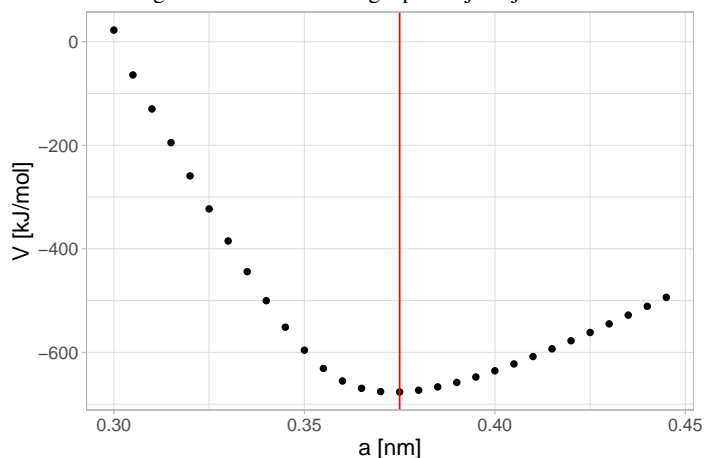
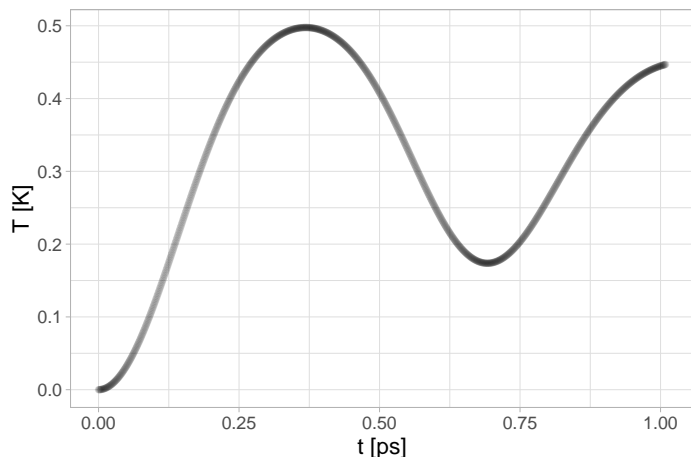


Fig. 8. Zależność temperatury chwilowej od czasu dla  $a = 0,375 nm$



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  $T_0$

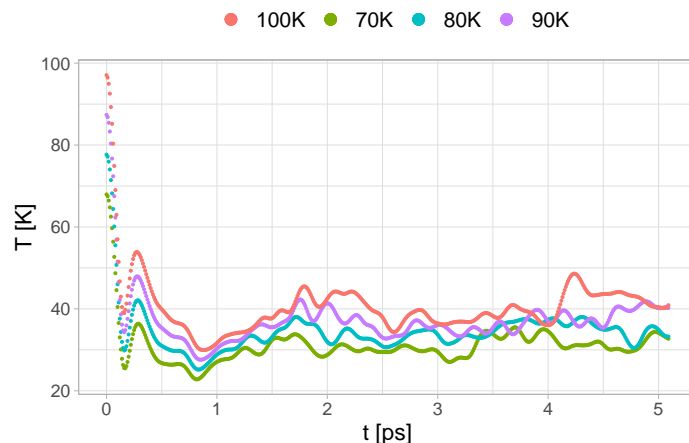
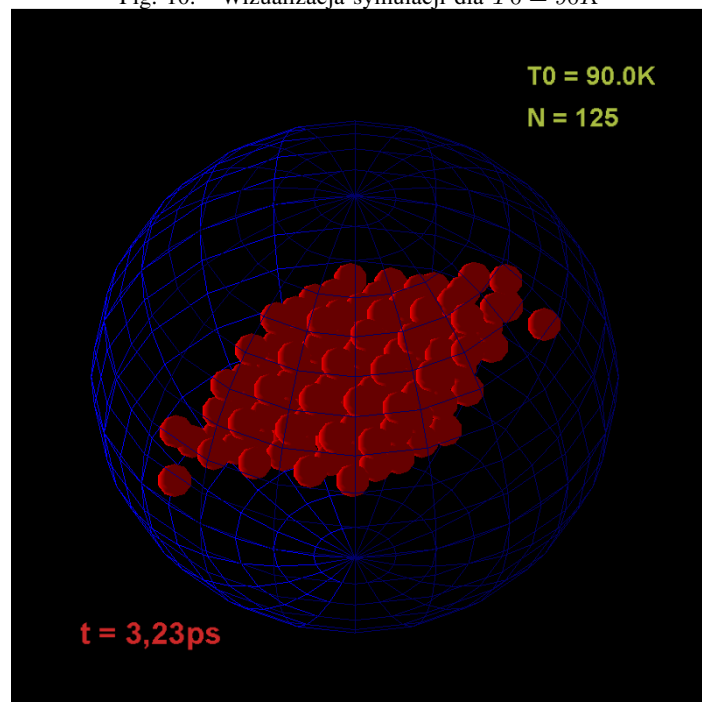


Fig. 10. Wizualizacja symulacji dla  $T_0 = 90K$



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 stopnienie 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. Symulacja została przeprowadzona dla  $\tau = 10^{-4}$  ps.

Fig. 11. Zależność średniej temperatury od liczby kroków termalizacji

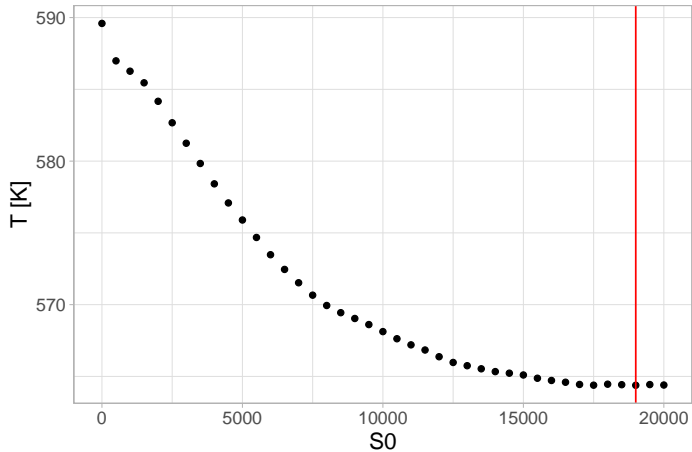


Fig. 12. Zależność średniej temperatury od średniego ciśnienia

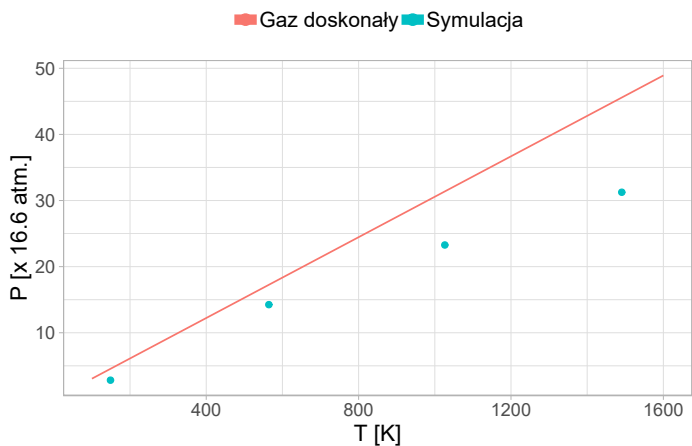


Fig. 13. Zależność chwilowej temperatury od czasu dla wybranych wartości  $T_0$ . Czarna pionowa linia oznacza liczbę kroków termalizacji  $S_0$

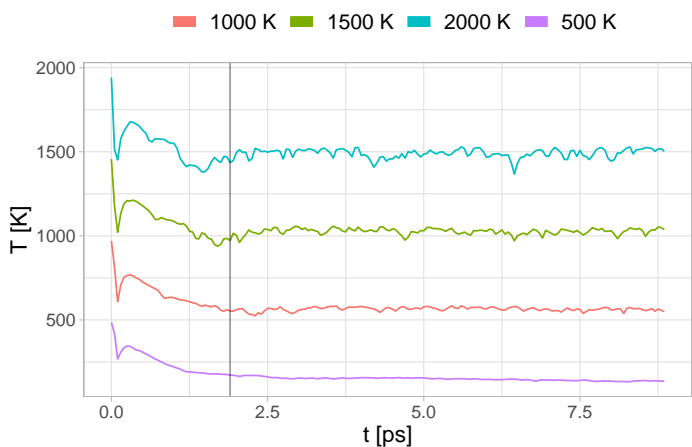
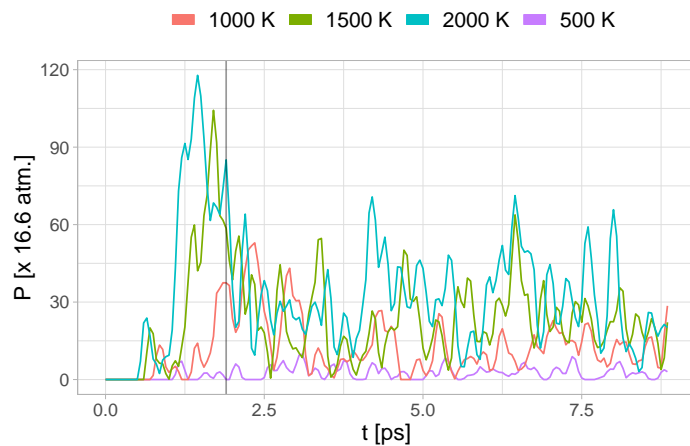


Fig. 14. Zależność chwilowego ciśnienia od czasu dla wybranych wartości  $T_0$ . Czarna pionowa linia oznacza liczbę kroków termalizacji  $S_0$



#### IV. KOD ŹRÓDŁOWY

Program jest dostępny na platformie Github pod adresem: <https://github.com/robertjankowski/kms-lab-argon>.

#### REFERENCES

- [1] JOGL - Java Binding for the OpenGL API - JogAmp Data dostępny: 30.10.2019