

شبیه‌سازی رایانه‌ای در فیزیک

تمرین نهم: دینامیک مولکولی

فرض کنید که برهمکنش میان اتم‌های گاز آرگون برهمکنش واندروالس (پتانسیل لِنارد جونز) است. با انتخاب مناسب دستگاه واحدهای کاهیده، یک سیستم متشکل از ۱۰۰ اتم آرگون را در فضای دو بعدی شبیه‌سازی کنید. به عنوان شرایط اولیه، سرعت ذرات را تصادفی در نظر بگیرید و مکان آن‌ها را به گونه‌ای انتخاب کنید تا تمام ذرات به طور منظم در نیمه چپ جعبه قرار بگیرند.

- بقای انرژی سیستم را تحقیق کنید و نمودار تعداد ذرات موجود در نیمه چپ را برحسب زمان رسم کنید.
- رفتار دما و فشار گاز برحسب زمان را رسم کنید و مقدار تعادلی آن‌ها را محاسبه کنید.
- تابع خودهمبستگی سرعت‌ها را محاسبه کنید و زمان واهلش سیستم را به دست آورید.
- با تغییر انرژی سیستم گاز را در چند دمای مختلف شبیه‌سازی کنید و نشان دهید که از معادله‌ی گاز واندروالس پیروی می‌کند.
- با کاهش دما تغییر فازهای گاز را مشاهده کنید.
- **سوال امتیازی ۱:** فیلمی از رفتار اتم‌ها در فازهای جامد، مایع و گاز تهیه کنید.
- **سوال امتیازی ۲:** برای آن که خواص آماری را بهتر مشاهده کنید، تعداد ذرات را افزایش دهید و نتایج را برای سیستم پر ذره‌تر (حدود ۱۰۰۰ ذره) تکرار کنید.