

# **Задание 2**

## **Молекулярная динамика**

**София Белен Лопес Висенс**  
Группа Б02-903  
Московский физико-технический институт

# Содержание

1	Радиальная функция распределения	3
2	Автокорреляционная функция скорости	4
3	Коэффициента самодиффузии	4
4	Сравнение с первого задания	5

# 1 Радиальная функция распределения

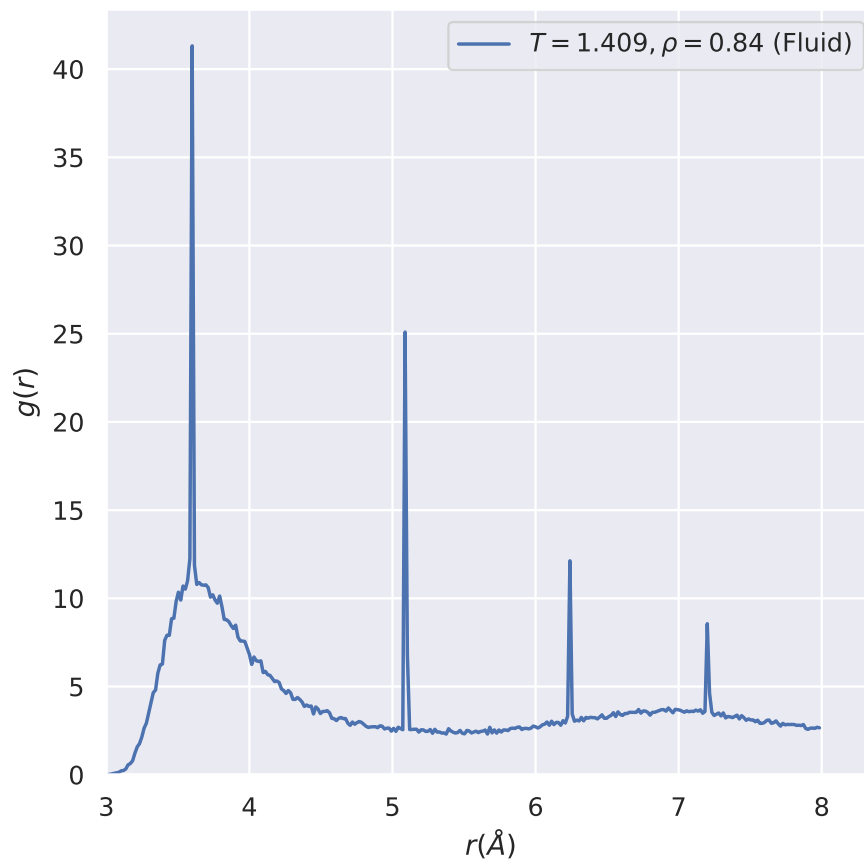


Рис. 1: Радиальная функция распределения для жидкого Аргона при  $\rho = 0.0213 \frac{\text{atoms}}{\text{\AA}^3}$ ,  $T = 85^\circ K$ . Соответственные параметры в единицах Леннарда-Джонса  $\rho = 0.84$ ,  $T = 1.409$ .

## 2 Автокорреляционная функция скорости

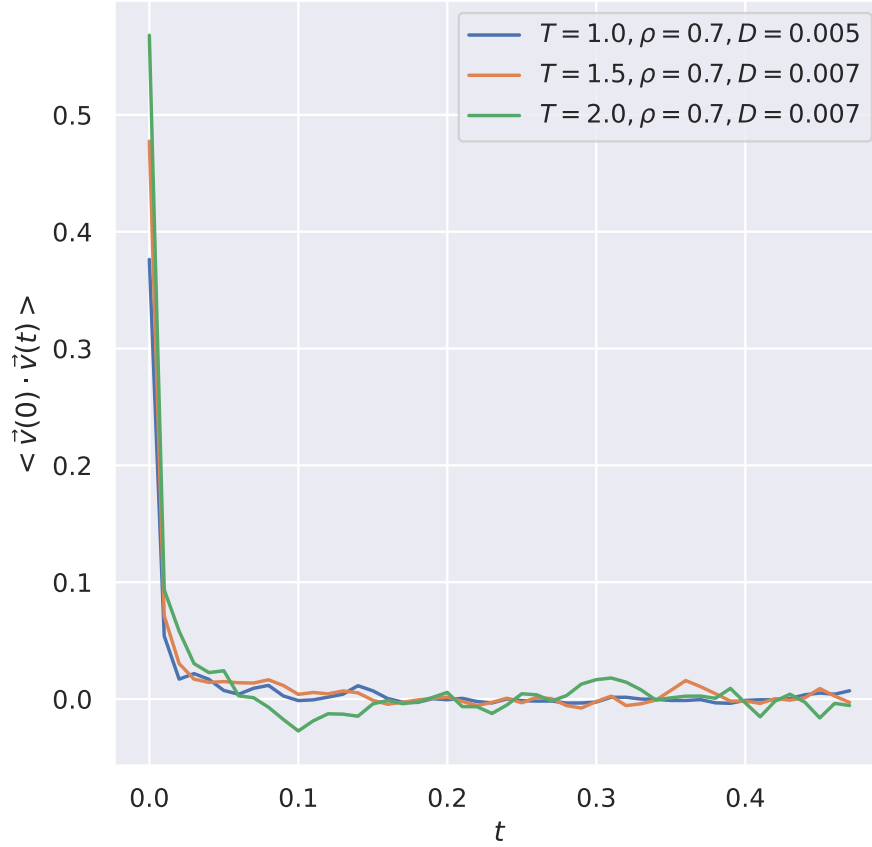


Рис. 2: График автокорреляционной функции скорости в зависимости от времени при разных температурах.

## 3 Коэффициента самодиффузии

Maybe we are still in subdiffusive regime? But then shouldn't  $D$  be lower than expected, and not higher? That probably means we are still in ballistic regime.

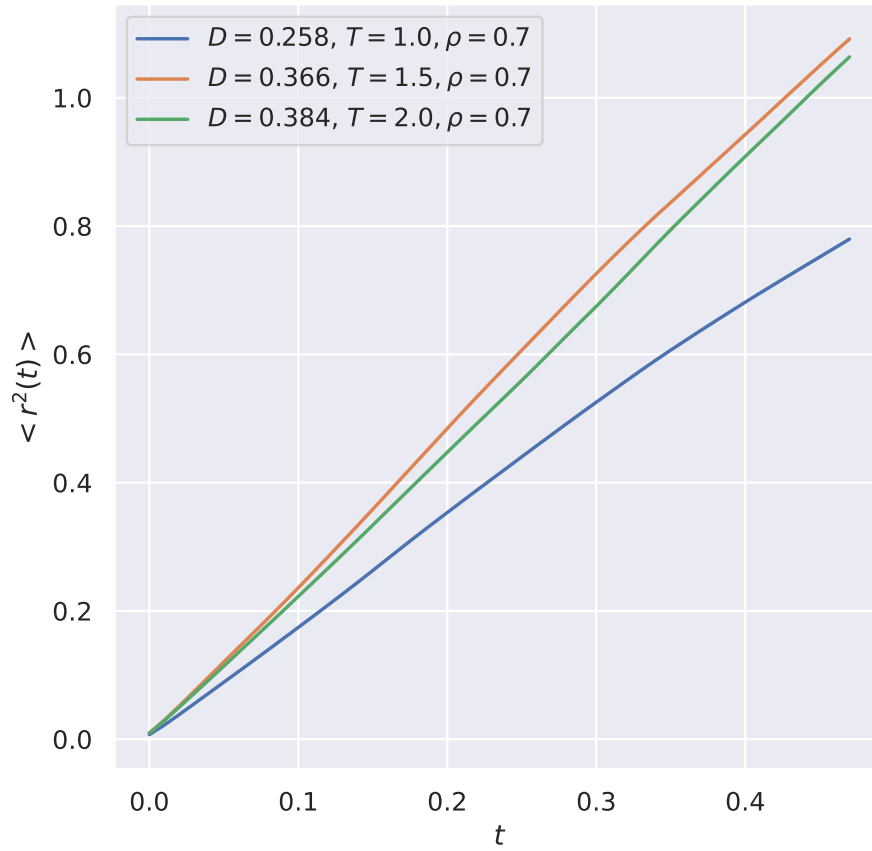


Рис. 3: График зависимость среднего квадратичного смещения в зависимости от времени. Расчет коэффициента самодиффузии через формулы Эйнштейна-Смолуховского.

Таблица 1: Коэффициент самодиффузии полученный через формулы Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо при  $\rho = 0.7$ .

Температура	Эйнштейна-Смолуховского	Грина-Кубо	Ожидаемое значение
1.0	0.258		0.105
1.5	0.366		0.156
2.0	0.384		0.217

## 4 Сравнение с первого задания

Вопрос: Как это  $\langle \Delta r^2(t) \rangle$  связано с значением из другого пункта?

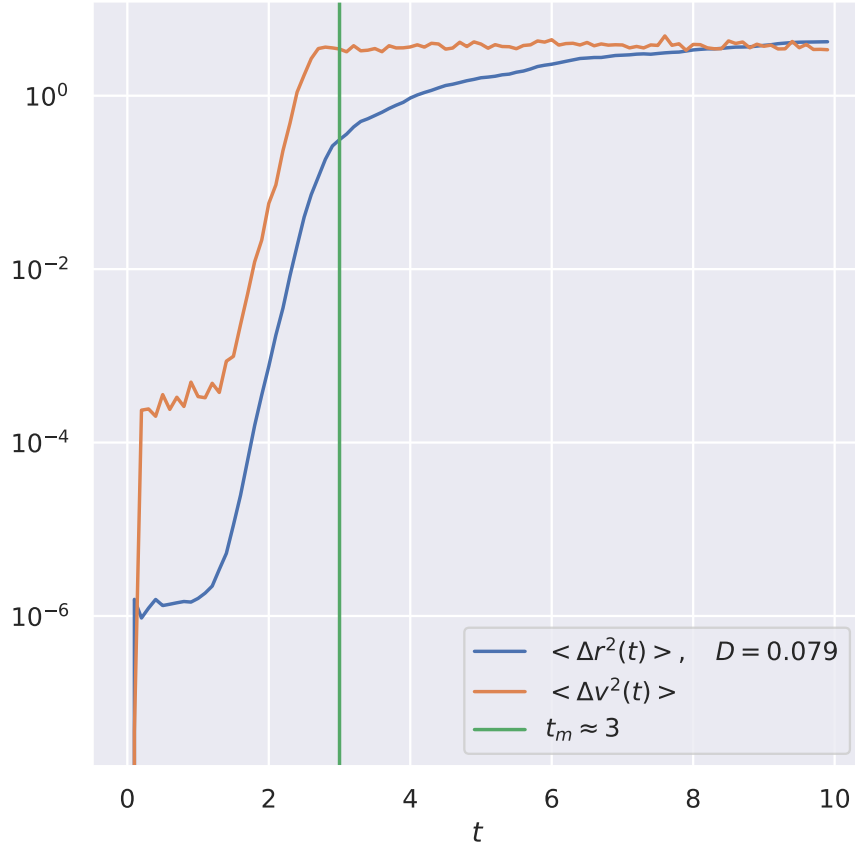


Рис. 4: Усреднённые разбегания координат  $\langle \Delta r^2(t) \rangle$  и скоростей  $\langle \Delta v^2(t) \rangle$  на двух траекториях, рассчитанных из тождественных начальных условий с шагами  $\Delta t_1 = 0.001$  и  $\Delta t_2 = 0.0001$ . При температуре  $T = 1.0$  и плотности  $\rho = 0.7$  получим коэффициент самодиффузии  $D = 0.079$ . Он оказывается на порядок меньше значения полученного с помощью соотношения Эйнштейна-Смолуховского