

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	Расчёт коэффициента самодиффузии	4
4	Сравнение с первым заданием	5
5	Влияние термостата на расчет коэффициента диффузии	7

1 Радиальная функция распределения

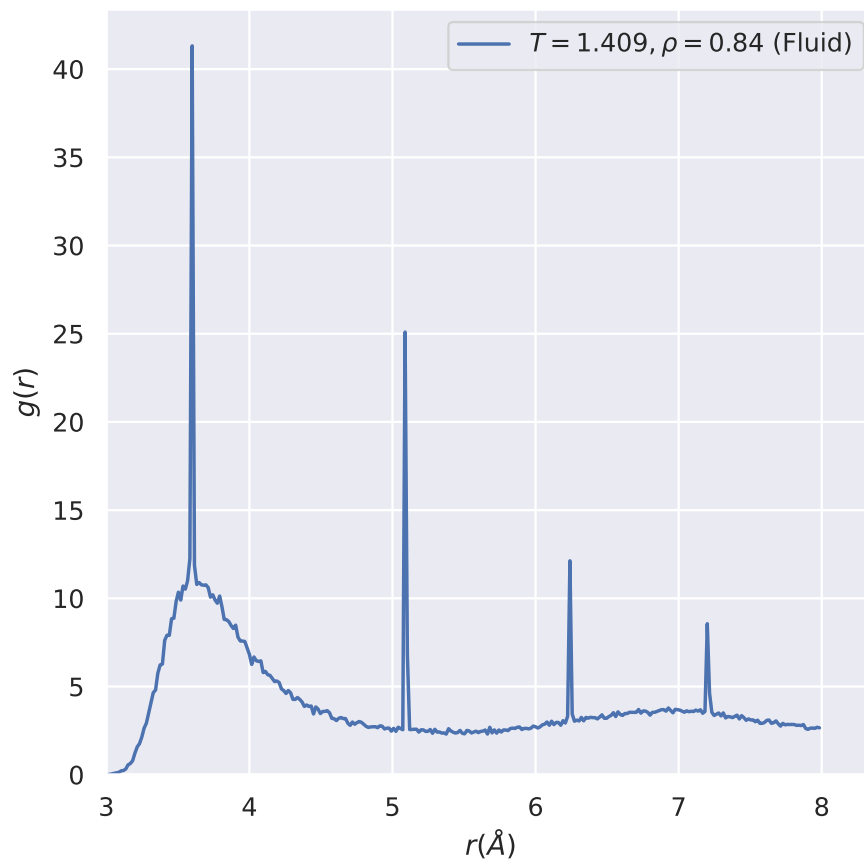


Рис. 1: Радиальная функция распределения для жидкого Аргона при $\rho = 0.0213 \frac{\text{atoms}}{\text{\AA}^3}$, $T = 85^\circ K$. Соответственные параметры в единицах Леннарда-Джонса $\rho = 0.84$, $T = 1.409$.

2 Автокорреляционная функция скорости

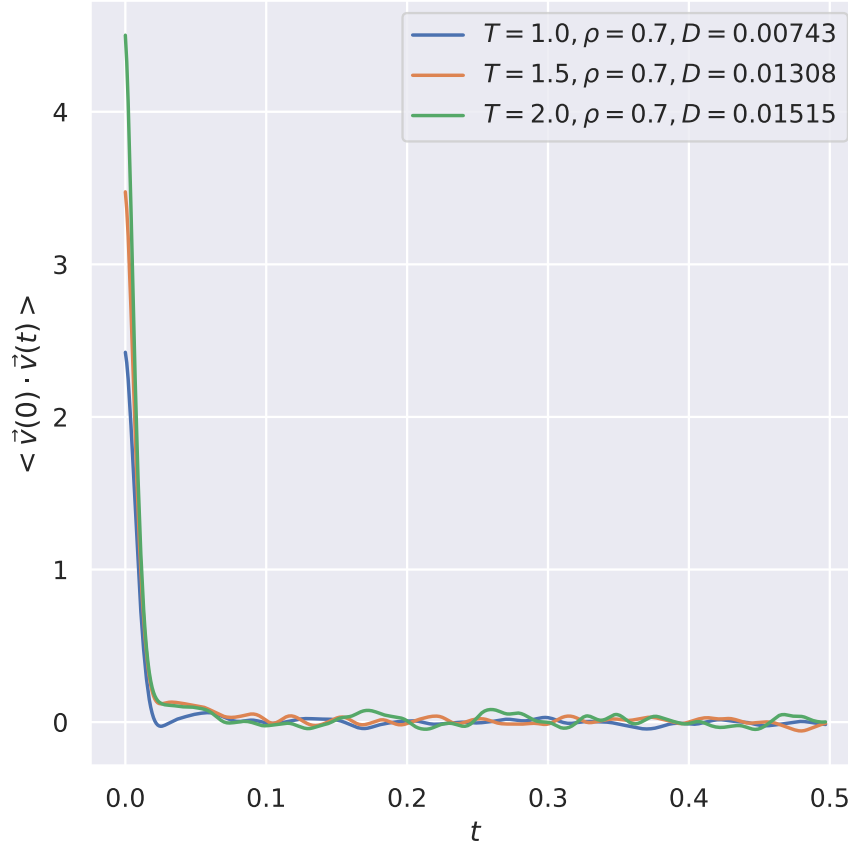


Рис. 2: График автокорреляционной функции скорости в зависимости от времени при различных температурах. Расчёт коэффициент самодиффузии с помощью формулы Грина-Кубо.

3 Расчёт 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.

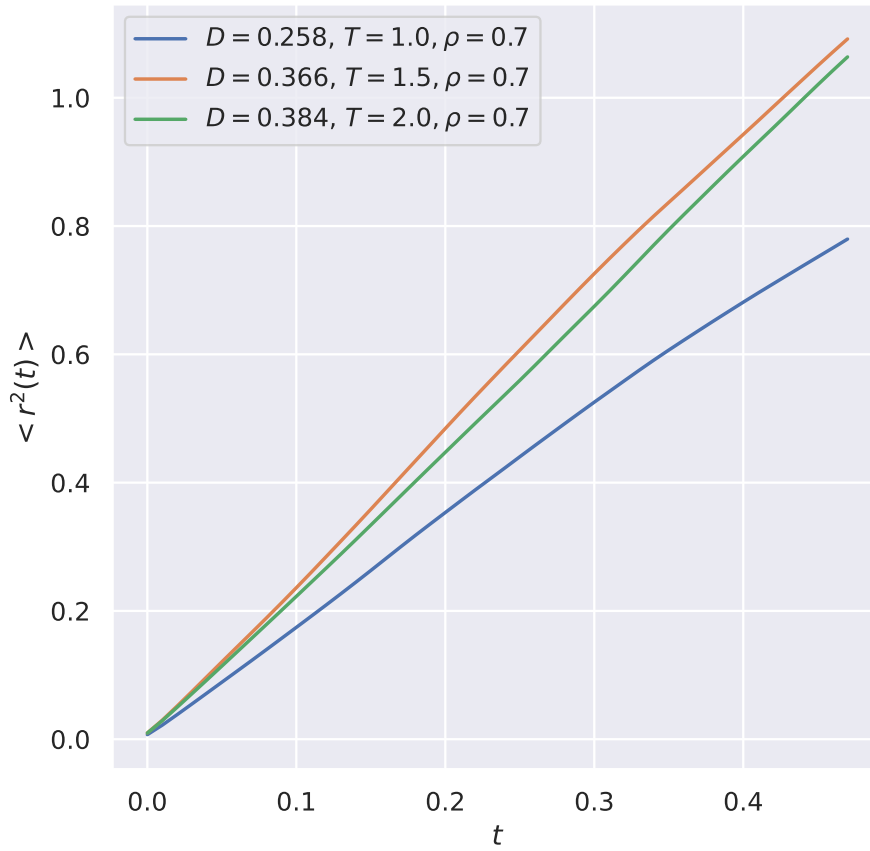


Рис. 3: График зависимость среднего квадратичного смещения в зависимости от времени. Расчет коэффициента самодиффузии через формулу Эйнштейна-Смолуховского.

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

Температура	Эйнштейна-Смолуховского	Грина-Кубо	Ожидаемое значение
1.0	0.258	0.00743	0.105
1.5	0.366	0.01308	0.156
2.0	0.384	0.01515	0.217

4 Сравнение с первым заданием

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

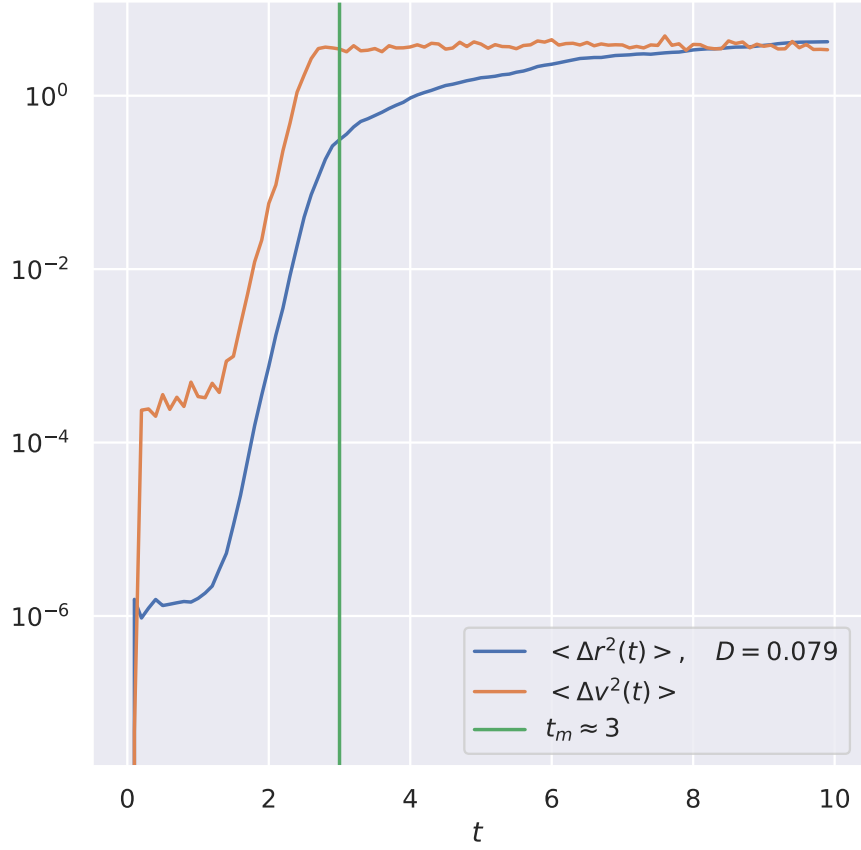


Рис. 4: Усреднённые разбегания координат $\langle \Delta r^2(t) \rangle$ и скоростей $\langle \Delta v^2(t) \rangle$ на двух траекториях, рассчитанных из тождественных начальных условий с шагами $\Delta t_1 = 0.001$ и $\Delta t_2 = 0.0001$. При температуре $T = 1.0$ и плотности $\rho = 0.7$ получим коэффициент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

5 Влияние термостата на расчет коэффициента диффузии

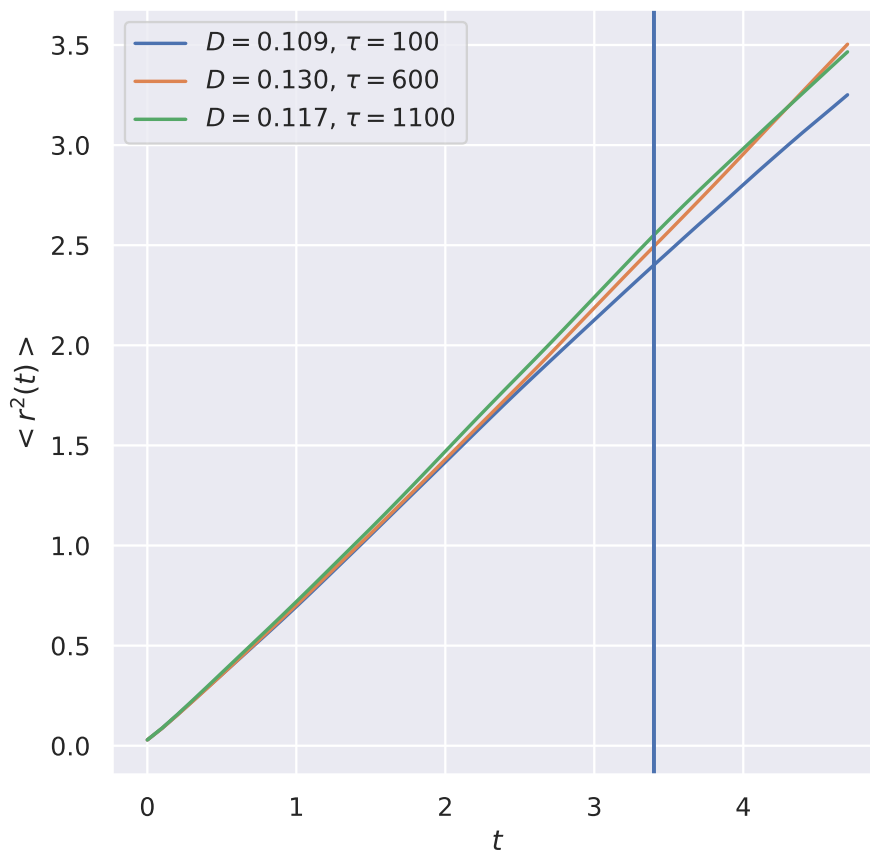


Рис. 5: График зависимости среднего квадратичного смещения в зависимости от времени. Расчет коэффициента самодиффузии через формулу Эйнштейна-Смолуховского при температуре $T = 1.5$ для различных характерных величин термостата τ . Вертикальная линия момент, начиная с которого мы рассчитаем коэффициент диффузии.