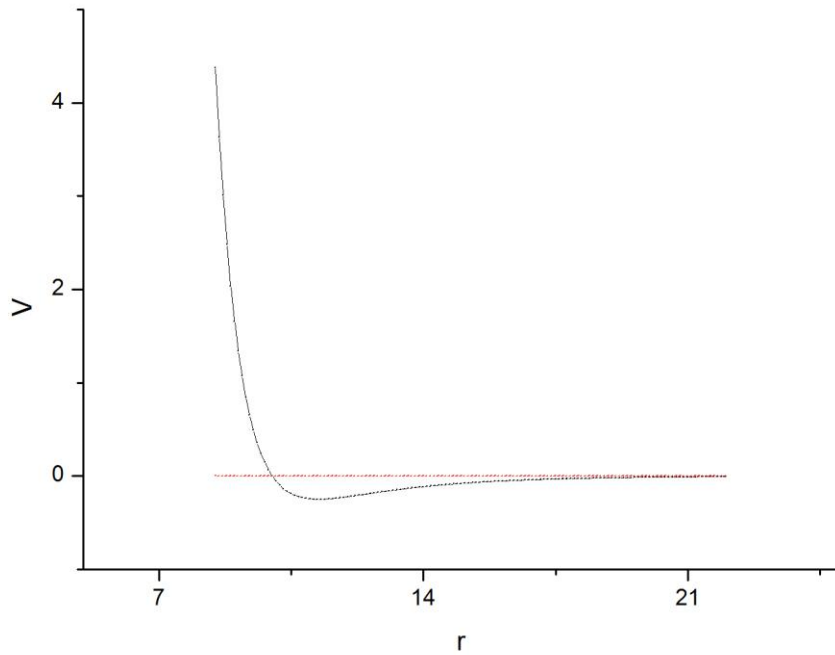


计算物理第一周作业

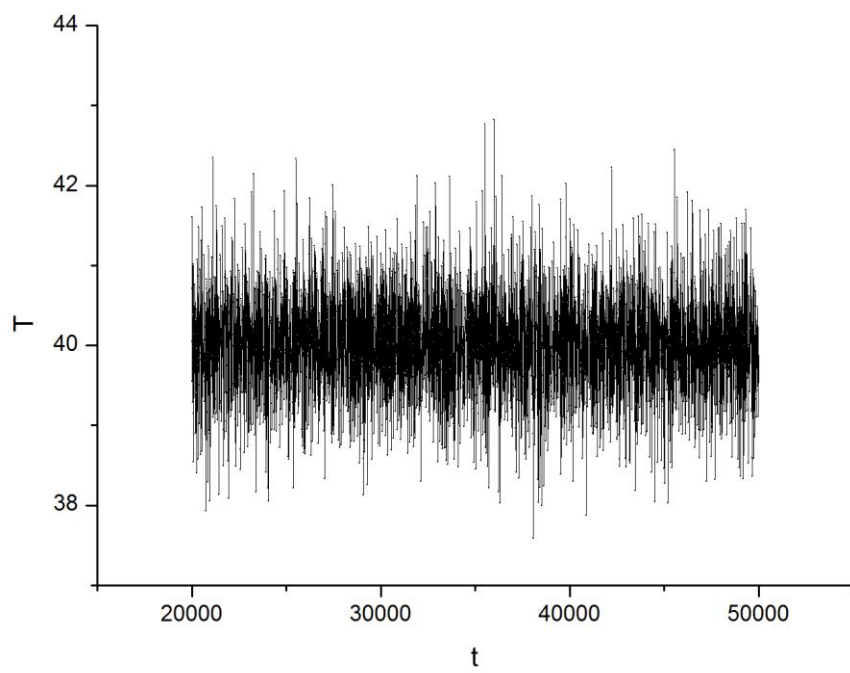
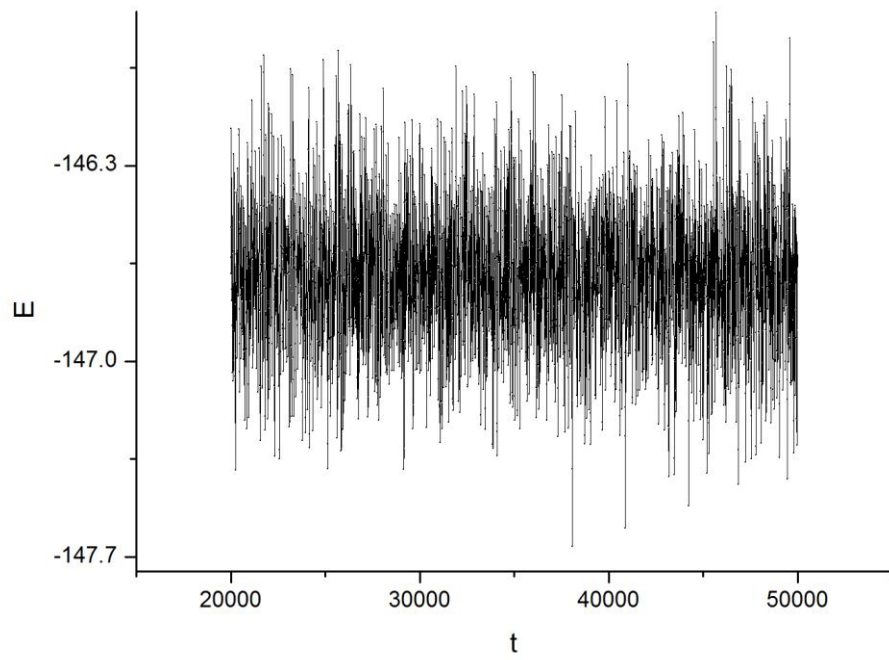
顾慧珺 12307110383

3, 求两个 Ar 原子的 L-J 势能曲线:

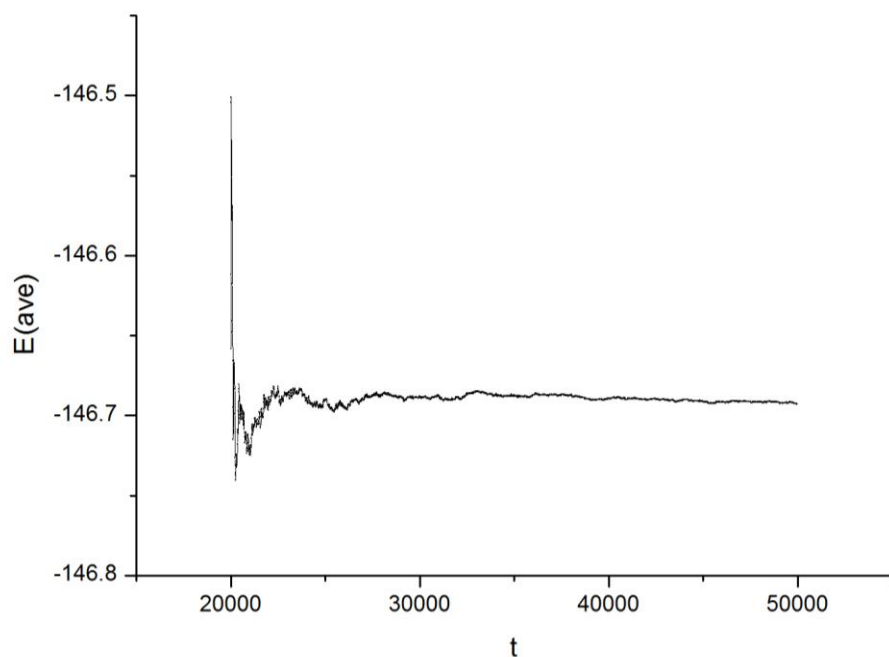
偷个懒, 直接把公式输进去用 origin 作图:



4, 对于这个 NVT 系统, 可以看到温度和能量都是有涨落的:



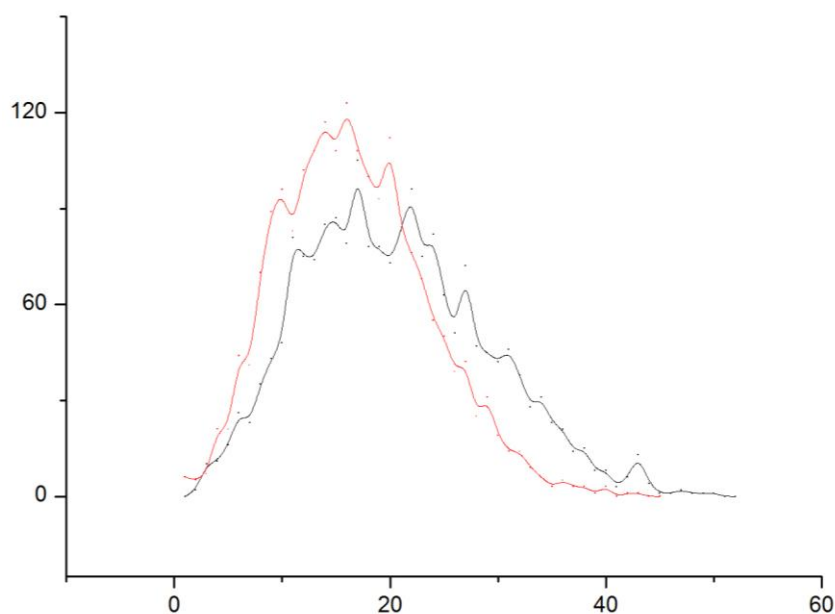
但是如果对能量求均值，可以看出，随着求平均的时间段增加，能量渐趋稳定：



温度对于时间的平均值与这个相似，不再列出。

5，请问一下，麦克斯韦分布适用于理想气体吧？这样的话分子之间就没有势能，只存在弹性碰撞。这样要怎么定义他们之间的相互作用呢？于是我就不会写 script 了。。。

但是我用 pair_style lj 做出来的分布图如下：



其中，红色 $T=50\text{K}$ ，黑色 $T=80\text{K}$ 。为了节省时间只做了这两个温度，而且只 run 了 3000 步。

可以看出图像非常粗糙，仍可以隐约看出峰的位置，温度越高，峰值对应的速率越大。

6, 第六题来不及写了, 对不起……因为是第一次接触 linux 和 lammgs, 总要花点时间适应的嘛。而且开学前两周有很多事情要忙……求助教原谅 555