

第一次作业

文轩 12307110227

Part1. Ar 原子的 L-J 势能图

利用 mathematica 作出了两个 Ar 原子的 L-J 势能图，如图 1 所示：

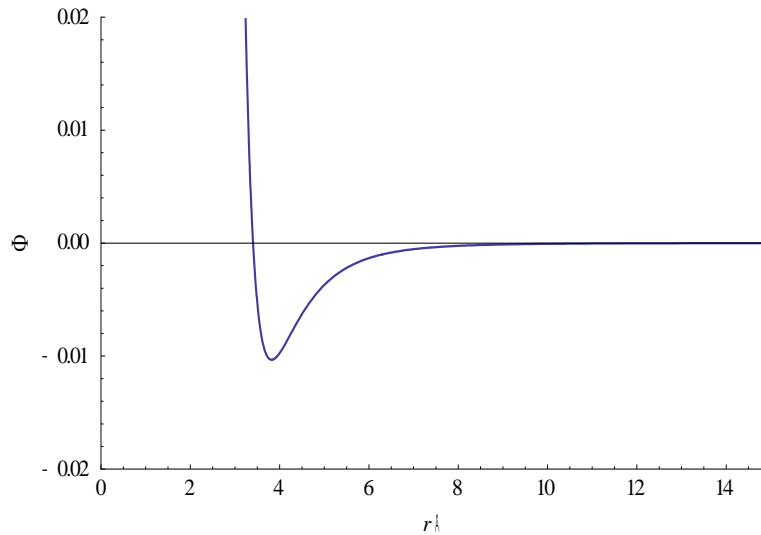


图 1. Ar 原子的 L-J 势能图

由图可知，将 Ar 的截断半径设为 8.5 左右是合理的。

Part2. NVT 体系的模拟：

建立了一个 $8 \times 8 \times 8$ 的 fcc 的 Ar 原子体系，得到的 T vs t、E vs t、平均温度 $\langle T \rangle$ vs t、平均能量 $\langle E \rangle$ vs t、温度标准差 Error(T) vs t、能量标准差 Error(E) vs t 等关系图如图 2~7 所示。

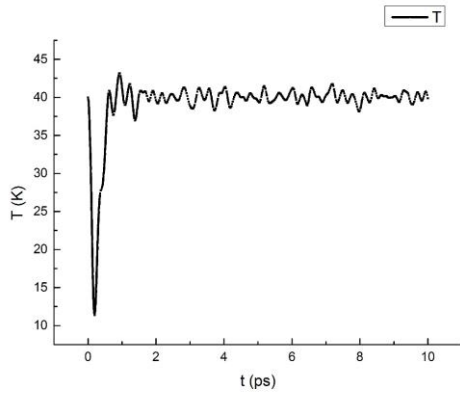


图 2. T vs t

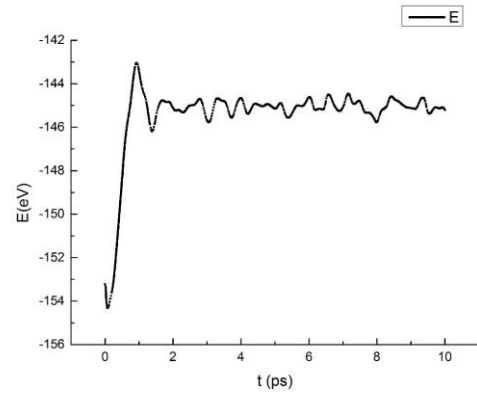


图 3. E vs t

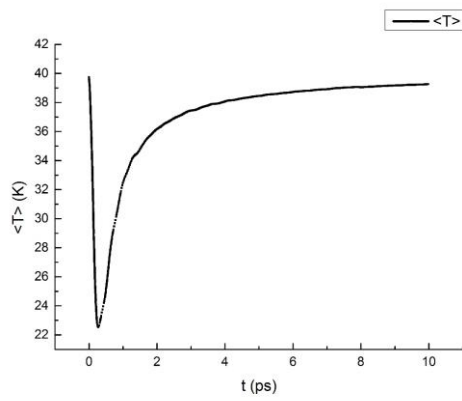


图 4. 平均温度<T> vs t

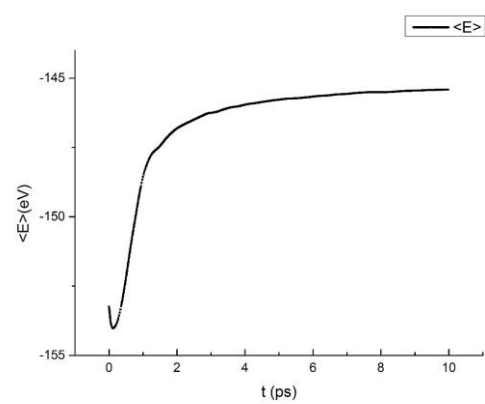


图 5. 平均能量<E> vs t

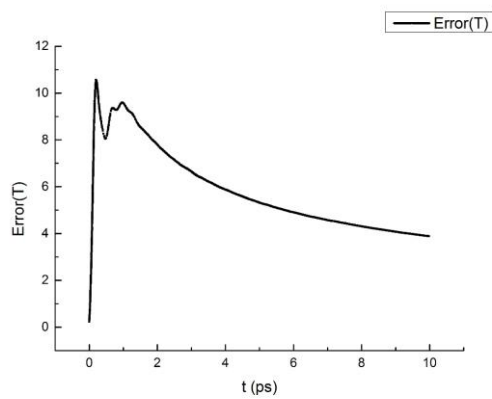


图 6. 温度标准差 Error(T) vs t

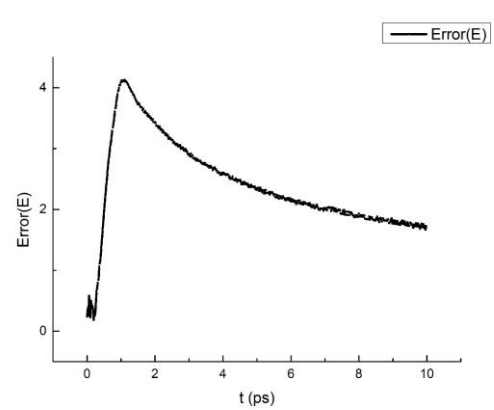


图 7. 能量标准差 Error(E) vs t

Part3. 麦克斯韦分布律的模拟

依旧沿用 NVT 体系，构建了 $20 \times 20 \times 20$ 的 Ar 原子体系，根据之前的经验，模拟 4000 步之后基本已经收敛，故选取 4000 步之后体系的所有分子的速度进行统计，得到了速度分

布的曲线，并利用 Origin 进行了拟合，拟合图像如下图 8 所示。

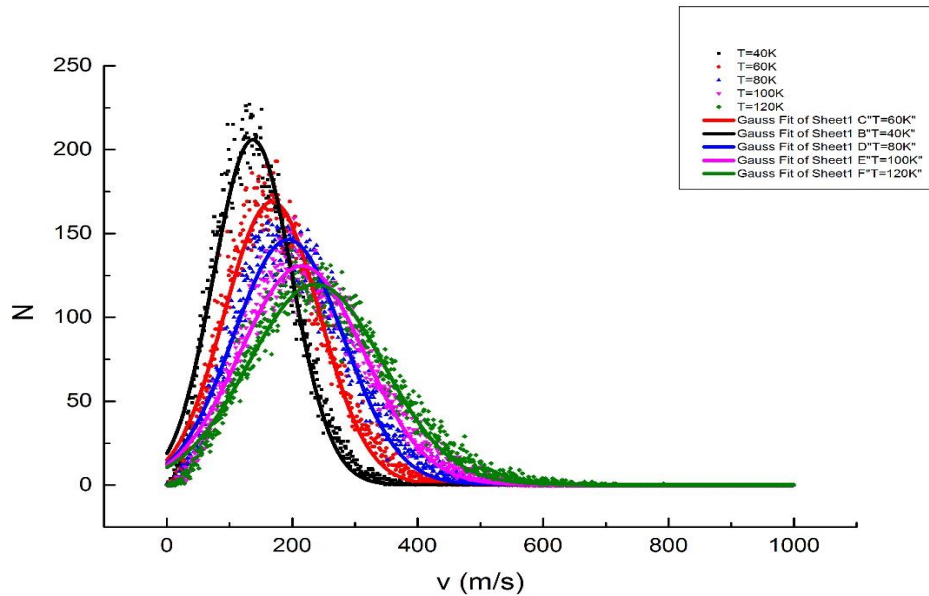


图 8. 不同温度麦克斯韦分布拟合图

由图可知，随着温度的上升，最可几速率也在上升，与麦克斯韦速度分布律吻合。且曲线拟合的 R^2 均在 0.97 以上，说明每条曲线的拟合效果都很好，基本验证了麦克斯韦速度分布律。

Part4 温度 T 的方差以及 E/N 的方差随粒子数 N 的变化曲线

分别构建了 $2 \times 2 \times 2$ 、 $3 \times 3 \times 3$ 、 $4 \times 4 \times 4$ 、 $5 \times 5 \times 5$ 、 $6 \times 6 \times 6$ 、 $7 \times 7 \times 7$ 、 $8 \times 8 \times 8$ 、 $9 \times 9 \times 9$ 、 $10 \times 10 \times 10$ 、 $11 \times 11 \times 11$ 、 $12 \times 12 \times 12$ 的 Ar 的 fcc 体系，均模拟 10000 步，得到的温度 T 的方差以及 E/N 的方差随粒子数 N 的变化曲线如下图 9、10 所示：

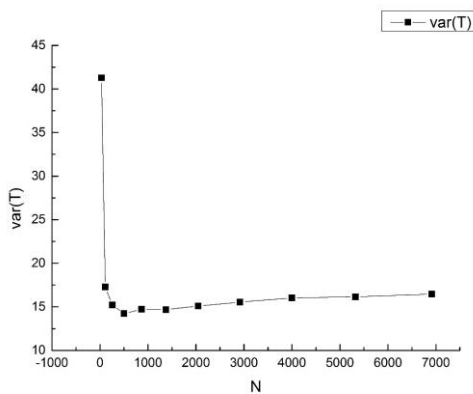


图 9. $\text{Var}(T)$ vs N

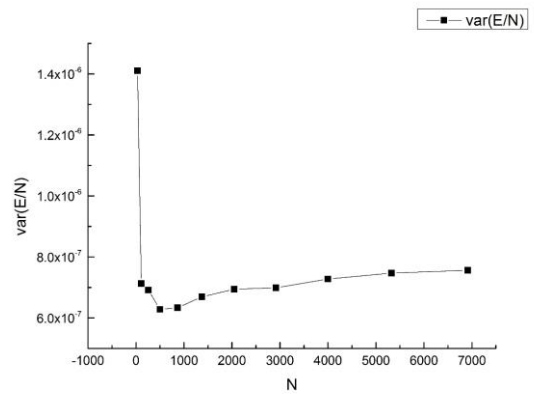


图 10. $\text{Var}(E/N)$ vs N

由图 9、10 可知， T 的方差以及 E/N 的方差随 N 的增大的变化趋势类似，均是先下降再缓慢上升。这说明在模拟步数为 10000 步时，误差最小的、最合适的体系粒子数为 500 左

右，即 $5 \times 5 \times 5$ 的体系最为合适。