Symulacje komputerowe w fizyce

Dynamika Molekularna
Zadania za 15 punktów

Napisać program do symulacji metodą dynamiki molekularnej. W zadaniach od 1 do 10 przyjąć, że oddziaływanie między cząstkami zadane jest potencjałem Lennarda-Jonesa. Przedstawić graficznie osiąganie równowagi oraz wykonać obliczenia dotyczące jednego z poniższych problemów.

1. Trójwymiarowy model z periodycznymi warunkami brzegowymi. Przedstawić zależność radialnej funkcji korelacyjnej od gęstości liczby cząstek.

2. Trójwymiarowy model z periodycznymi warunkami brzegowymi. Wyznaczyć zależność ciśnienia od gęstości liczby cząstek dla kilku temperatur.

3. Trójwymiarowy model z periodycznymi warunkami brzegowymi. Wyznaczyć zależność współczynnika dyfuzji od temperatury dla kilku wartości gęstości liczby cząstek.

4. Dwuwymiarowy model z periodycznymi warunkami brzegowymi. Przedstawić zależność radialnej funkcji korelacyjnej od gęstości liczby cząstek.

5. Dwuwymiarowy model z periodycznymi warunkami brzegowymi. Zbadać zależność współczynnika dyfuzji od temperatury dla kilku wartości gęstości liczby cząstek.

6. Trójwymiarowy klaster (swobodne warunki brzegowe). Wyznaczyć zależność energii, ciepła właściwego od temperatury.

7. Dwuwymiarowy klaster (swobodne warunki brzegowe). Wyznaczyć zależność radialnej funkcji korelacyjnej od temperatury i zbadać równowagowy kształt kryształu .

8. W trójwymiarowym pudle z periodycznymi warunkami brzegowymi wzdłuż kierunków $\hat{x}$, $\hat{y}$ i sztywnymi ściankami wzdłuż kierunku $\hat{z}$ umieścić kilka warstw atomowych (np. 8) struktury krystalicznej regularnej powierzchniowo centrowanej (FCC). Pierwszą warstwę położyć na dnie pudła. Górną część pudła pozostawić pustą. Zbadać rozkład gęstości liczby atomów wzdłuż kierunku $\hat{z}$ w zależności od temperatury oraz zależność energii od temperatury.

9. Trójwymiarowy model z periodycznymi warunkami brzegowymi w zespole kanonicznym (NVT). Stosując metodę Nosego-Hoovera wyznaczyć zależność ciśnienia od gęstości liczby cząstek dla kilku temperatur. Zbadać rozkład energii.

10. Dwuwymiarowy model z periodycznymi warunkami brzegowymi w zespole kanonicznym (NVT). Stosując metodę Nosego-Hoovera wyznaczyć zależność współczynnika dyfuzji od temperatury oraz rozkład energii dla kilku wartości gęstości liczby cząstek.

11. Dynamika molekularna sztywnych kul. Przedstawić zależność ciśnienia od gęstości liczby cząstek dla kilku temperatur.

12. Dynamika molekularna sztywnych kul. Przedstawić zależność współczynnika dyfuzji od gęstości liczby cząstek dla kilku temperatur.

13. Dynamika molekularna sztywnych dysków. Zbadać zależność radialnej funkcji korelacyjnej od gęstości liczby cząstek dla kilku temperatur .

14. Dynamika molekularna sztywnych dysków. Przedstawić zależność współczynnika dyfuzji od gęstości liczby cząstek dla kilku temperatur.

15. Transport w dwuwymiarowych sieciach antykropek.

    Rozwiązać równania ruchu elektronu w periodycznym potencjale

    $$U(x,y) = U_0\left[\cos(2\pi a x)\cos(2\pi a y)\right]^{64}$$

    i w poprzecznym polu magnetycznym $B\hat{z}$.

    Obliczyć funkcję autokorelacyjną prędkości

    $$F(t) = < v_\alpha(0) v_\beta(t) > \qquad \text{gdzie } \alpha, \beta = x, y$$

    dla kilku wartości pola magnetycznego.

16. Transport w dwuwymiarowych sieciach antykropek.

    Obliczyć zależność współczynnika dyfuzji elektronu (z zadania 15) od pola magnetycznego.