Dynamika Molekularna

Zadania za 5 punktów

1. Gaz Lorentza. Obliczyć współczynnik dyfuzji cząstki poruszającej się ze stałą szybkością w dwuwymiarowym układzie rozpraszaczy (dysków) rozmieszczonych regularnie w węzłach sieci kwadratowej. Zbadać zależność współczynnika dyfuzji od średnicy rozpraszacza.

2. Gaz doskonały. W pudle o objętości $V = L^3$ mamy N cząstek gazu doskonałego, które zmieniają prędkości jedynie w wyniku zderzeń ze ściankami pudła. Przeprowadzić symulacje metodą dynamiki molekularnej i zbadać rozkład energii oraz liczby cząstek w podukładzie o objętości $V_1 << V$.

   Warunki początkowe: położenia cząstek są losowe, a prędkości początkowe mają rozkład Maxwella w temperaturze T.

3. Gaz doskonały. Zbadać zależność ciśnienia od temperatury oraz zależność radialnej funkcji korelacyjnej od odległości dla dla N cząstek w pudle o o objętości $V = L^3$

   Warunki początkowe: położenia cząstek są losowe, a prędkości początkowe mają rozkład Maxwella w temperaturze T.

4. Zbadać drgania łańcucha anharmonicznych oscylatorów

   $$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i \left[\frac{1}{2} \left(x_i - x_{i+1}\right)^2 + \frac{\beta}{4} \left(x_i - x_{i+1}\right)^4 \right]$$

   gdzie p_i jest pędem i-tej cząstki, x_i wychyleniem z położenia równowagi, a β nieliniowym parametrem.

5. Przewodnictwo cieplne jednowymiarowej sieci składającej się z $N + 2$ oscylatorów

   $$H = \sum_{i=0}^{N+1} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=0}^{N} \left[\frac{1}{2} \left(x_i - x_{i+1}\right)^2 + \frac{\beta}{4} \left(x_i - x_{i+1}\right)^4 \right]$$

   Sprzężenie łańcucha z dwoma termostatami może być prosto modelowane w następujący sposób. W każdym kroku czasowym prędkości pierwszej cząstki są generowane z rozkładu Maxwella o temperaturze T_1, a prędkości N-tej cząstki są losowo wybierane z rozkładu Maxwella o temperaturze T_2. Wychylenia zerowej i $N + 1$ cząstki są stałe. Zbadać rozkład temperatury wzdłuż łańcucha dla $T_1 = 100$, $T_2 = 10$, $\beta = 0.01, 1.5$.