

Projekt nr B.4.1

Symulacja przejść fazowych na przykładzie kropli cieczy w próżni

Wprowadzenie

Utwórzmy układ złożony z N cząsteczek klasycznych, oddziaływujących siłami dwuciałowymi z potencjałem Lennarda Jonesa: $U(r_{ij}) = r^{-12} - r^{-6}$. Cząsteczki rozmieścimy w przestrzeni tak, by ich środek masy pokrywał się z środkiem ekranu, całkowita energia potencjalna była ujemna, a pędy przyjmijmy zerowe: $p_i = 0$. Napiszmy równania ruchu i pozwólmy cząsteczkom poruszać się zgodnie z nimi. Cząsteczki początkowo powinny zbiec się w kroplę, zwiększając swoje energie kinetyczne. Część z nich rozpędzi się i opuści obszar zasięgu oddziaływań z pozostałymi (odparuje). Te cząsteczki eliminujemy z rachunku. Jednocześnie temperatura kropli (średnia energia kinetyczna cząsteczek) powinna spadać. Po odpowiednim czasie pozostałe cząsteczki powinny wykonywać małe drgania wokół położenia równowagi. Kropla zamrzła.

Zadania do wykonania

1. Wykonać symulację kropli w próżni w 1 wymiarze.
2. Powtórzyć symulację w dwóch wymiarach.
3. Czy w dwóch wymiarach zaobserwujemy krystalizację?

Śledzić liczbę cząsteczek i temperaturę kropli podczas całego eksperymentu.

Literatura

Wykład