

## Projekt nr C.4.2

# Modelowanie gazu o cząsteczkach dwuatomowych metodą dynamiki molekularnej

## Wprowadzenie

### Patrz projekt C.4.1

Rozważamy dwuwymiarowy model gazu o cząsteczkach dwuatomowych, w którym oddziaływania pomiędzy atomami opisywane są potencjałem Lennarda-Jonesa, natomiast w każdej cząsteczce odległość pomiędzy atomami jest taka sama i niezmienna.

Symulacja odbywa się w pudle obliczeniowym o okresowych warunkach brzegowych.

Warunki początkowe powinny być ustalane w ten sposób, by w odniesieniu do części odpychającej potencjału L-J cząsteczki nie zachodziły na siebie.

## Zadania do wykonania

1. Proszę przeprowadzić symulację ewolucji opisanego wyżej modelu gazu wychodząc od zadanych warunków początkowych.
2. Podczas symulacji proszę sprawdzać zachowanie energii, pędu i momentu pędu.
3. Proszę przedstawić przebieg temperatury układu w czasie.
4. Proszę sprawdzić, czy podczas symulacji obowiązuje zasada ekwipartycji energii.

## Literatura

1. Ashcroft N.W, Mermin N.D., „Fizyka ciała stałego”
2. Gould H., Tobochnik J., “An Introduction to Computer Simulation Methods”
3. Allen M.P., Tildesley D.J., “Computer Simulation of Liquids”