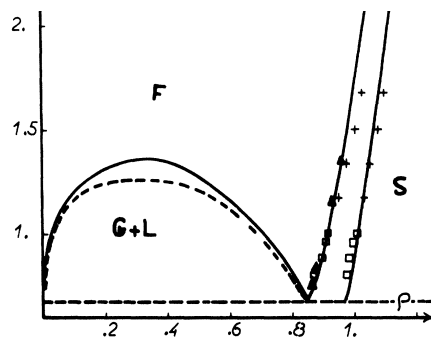
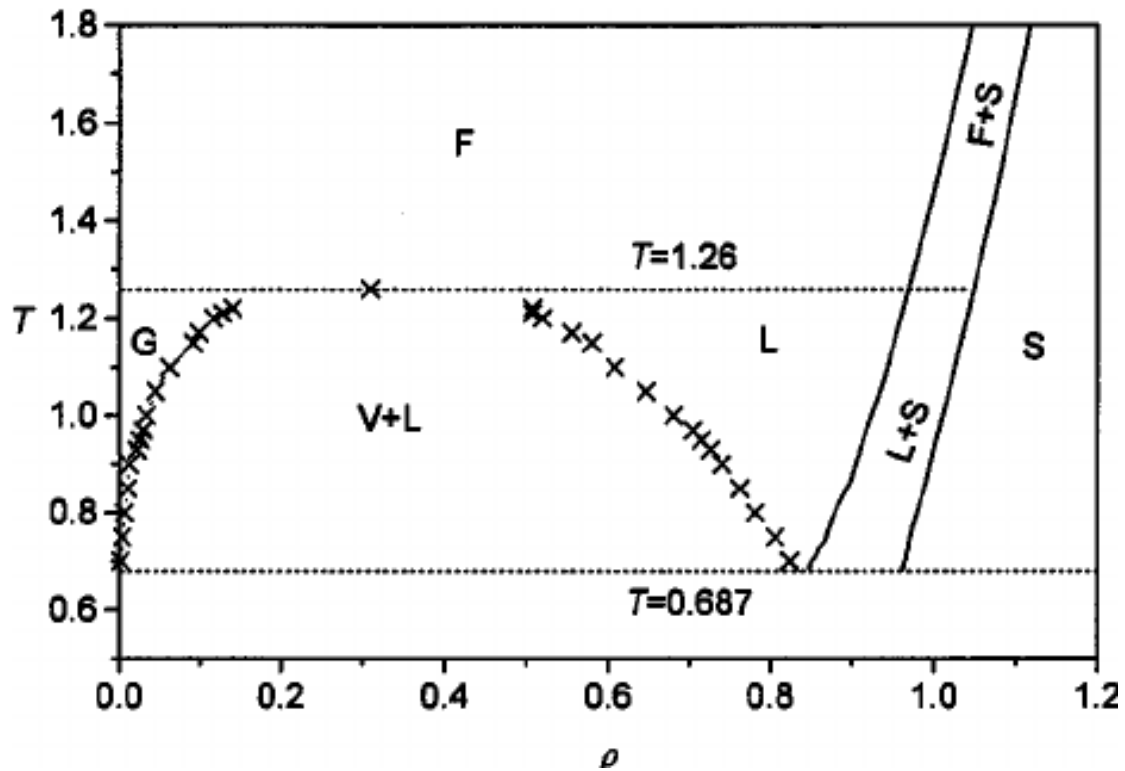


## MD-simuleringer av faseoverganger med LJ

3D fasediagram LJ med cutoff radius  $r_c=3.5$ :

Trippelpunkt:  $T_T=0.687$ ,  $\rho_T=0.85$ , kritisk punkt:  $T_C=1.26$ ,  $\rho_c=0.31$ .

Ge, Todd, Wu & Sadus Phys Rev E 67 061201 (2003)



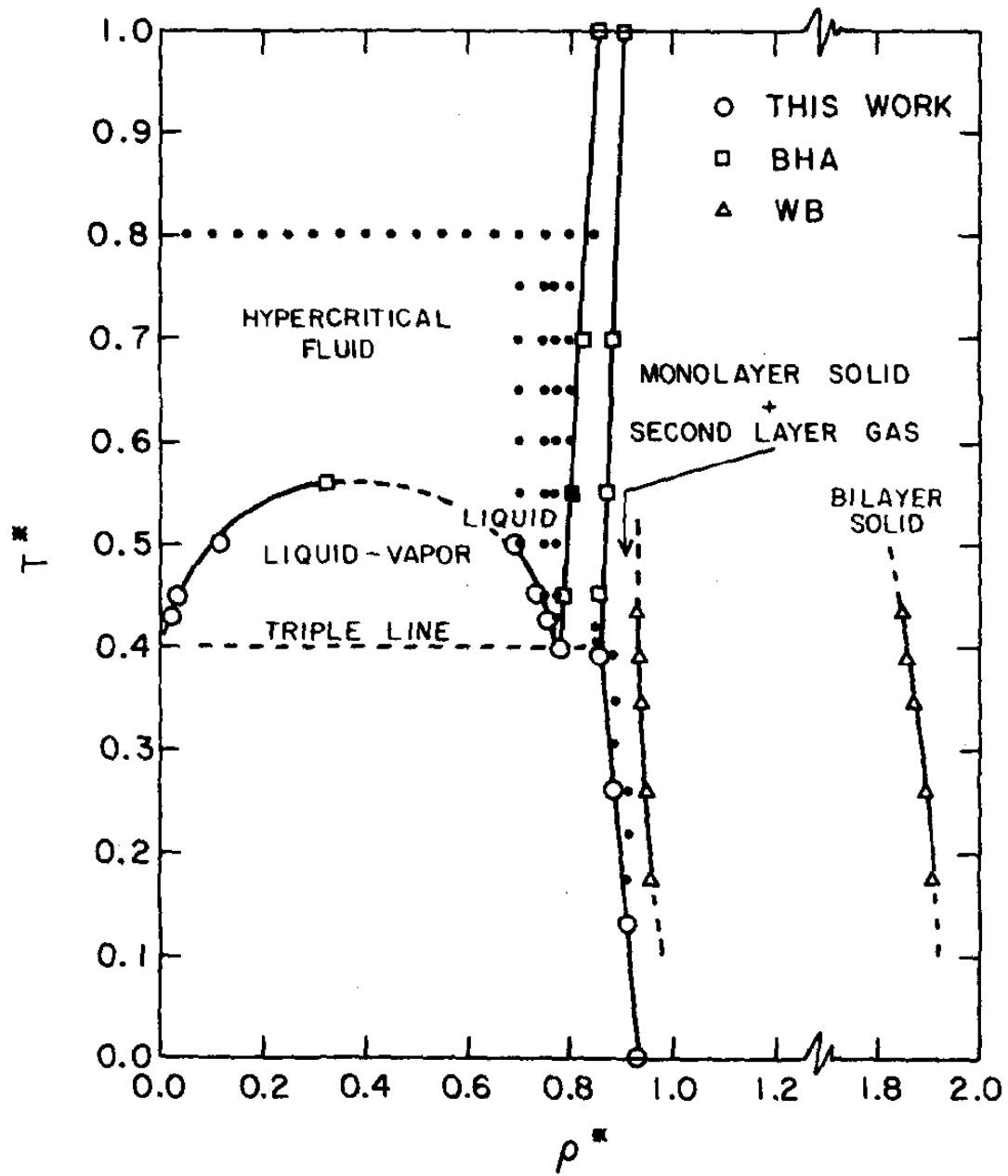
Hansen & Verlet, Phys Rev **184**, 151 (1969)

FIG. 3. Coexistence curve for the Lennard-Jones system (temperatures and densities in reduced units). The solid line gives our theoretical results. The broken line gives the experimental argon liquid-gas coexistence line taken from Michels *et al.*<sup>17,22</sup> The circles are experimental argon melting data taken from van Witzenburg and Stryland,<sup>20</sup> the crosses are experimental melting data taken from Crawford and Daniels.<sup>21</sup> The triangles indicate the crystallization densities according to the "law" stating that crystallisation occurs whenever  $S(k_\rho)$  reaches the value 2.85.

2D fasediagram LJ

Trippelpunkt:  $T_T=0.4, \rho_T=0.78$

Phillips, Bruch & Murphy, J Chem Phys 75, 5097 (1981)



## Oppgaver

Velg om du vil gjøre simuleringen i 2D (lettere å visualisere og raskere) eller 3D

**Start en simulering** med inputfilen `in.start_from_hexagonal` (2D, eller tilsvarende i 3D) (se beskrivelsen av `in.myfirstmd` s. 44 i kompendiet, avsnitt 3.3.2). Prøv å

- sette tettheten til trippelpunkt-tettheten og temperaturen til 0.5 i 2D og 1.0 i 3D.

Oppgave:

- Kjør 10000 tidssteg i nve og logg temperaturen og energien.
- Kjør 10000 tidssteg i nvt og logg temperaturen og energien.
- Hvor lang tid tar det å stabilisere/ekvilibrere?

**Start nye simuleringer i 2D** der du bruker  $\rho=0.5$ .

- Sett starthastighet til 1
- Gjør nvt-simuleringer med
  - $T=0.51$
  - $T=0.41$
  - $T=0.31$
- Beskriv hva du observerer