期末作业

请用课程提供的针对 Lennard-Jones 体系（参考的大小选取：立方盒子边长取 5，粒子数取 150）的 Molecular Dynamics (MD) 模拟程序（或者通用的 MD 模拟软件，如 DL_POLY、LAMMPS 等等），研究一级熔化相变的基本特性，并用获得的结果撰写一篇科研论文。

模拟过程：

- 1) 适当选择模拟参数，使得系统初始状态为离固液相变点较远的液体。
- 2) 逐步降低系统温度，使系统凝结成固体。
- 3) 再从固态逐步升温，使系统再次熔化成液体。

数据处理与分析：

- 1) 对固体和液体分别截取一个随机的系统构型，并用VMD 绘制图像。
- 2) 在固态区和液态区各取一个温度点计算 $g(r)$ ，并绘制在同一幅图上进行比较。
- 3) 绘出每个粒子的平均势能随温度变化的两条曲线（分别对应降温过程和升温过程）。两条曲线给出的一级相变点相同吗？为什么？
- 4) 用势能数据计算升温过程比热容随温度的变化。比热容在相变点连续吗？为什么？

论文撰写要求：

- 1) 用中文撰写。
- 2) 参照一般的科研论文格式，应包括以下几部分：标题，作者，所在单位，摘要，简介，方法，结果，小结，致谢，参考文献（至少两篇，有一篇可以是课本）。
- 3) 论文长短不限，但是要求既用词简洁，又描述充分。论述的完整性和清晰度，而不是论文的长短会对评分有很大影响。
- 4) 虽然这些并非创新结果，论文不足以发表，但是**请严格遵守科研道德！一经发现**有剽窃数据或抄袭现象，**立即以不及格论处，没有例外！**
- 5) 如在模拟或撰写论文过程中遇到困难，请尽早向主讲或助教寻求帮助，解决问题。**如果发现**有杜撰或人为修改数据的行为，**亦以不及格论处，没有例外！**