

Prof. Jan Kierfeld
Theoretische Physik Ib
Raum P1-O2-312
Tel. 3545
email: Jan.Kierfeld@tu-dortmund.de

10. Mai 2013
Bearbeitungszeit 2 Wochen
Besprechungen am 28./29./31. Mai

Computational Physics Übung 5

MD Simulation

Aufgabe 1: 2D Lennard-Jones-Fluid

Schreiben Sie eine Molekulardynamik Simulation für N identische Teilchen der Masse $m = 1$ mit paarweiser Lennard-Jones-Wechselwirkung

$$V(r) = 4 \left[\left(\frac{1}{r} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

(d.h. Längen werden in Einheiten von σ und Energien bzw. $k_B T$ in Einheiten von ϵ gemessen). Benutzen Sie periodische Randbedingungen in einem zweidimensionalen System der Größe $A = L \times L$. Verwenden Sie einen Cutoff $r_c = L/2$ bei der Kraftberechnung. Verwenden Sie den Verlet-Algorithmus mit Zeitschritt $h = 0.01$ zur Integration.

a) Initialisierung:

Setzen Sie die $N = 16$ Teilchen zu Beginn auf Plätze $\mathbf{r}(0) = \frac{1}{8}(1 + 2n, 1 + 2m)L$ mit $n, m = 0, \dots, 3$ in der Box $[0, L] \times [0, L]$. Wählen Sie die Anfangsgeschwindigkeiten so, dass $\sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(0) = 0$, d.h. dass die Schwerpunktsgeschwindigkeit zu Beginn gleich 0 ist. Schreiben Sie das Programm so, dass Sie die Geschwindigkeiten umskalieren können, um bei einer gegebenen "Anfangstemperatur" $T(t = 0)$ starten zu können.

b) Messung/Äquilibration:

Berechnen Sie die Schwerpunktschwindigkeit $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i$ als Funktion der Zeit. Berechnen Sie die Temperatur $T(t)$ als Funktion der Zeit. Berechnen Sie die potentielle Energie $E_{\text{pot}}(t) = \sum_{i < j=1}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ und die kinetische Energie $E_{\text{kin}}(t) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \mathbf{v}_i^2$ als Funktion der Zeit. Nach wie vielen Zeitschritten äquilibriert Ihr System?

Als Lösung Plots der Schwerpunktschwindigkeit, Temperatur, kinetischer Energie und potentieller Energie als Funktion der Zeit einschicken.

c) Messung:

Nachdem ihr System äquilibriert ist, messen Sie die Temperatur T und die Paarkorrelationsfunktion $g(r)$. Dazu führen Sie nach der Äquilibrationsphase eine Mittelung über 10^4 bis 10^6 Zeitschritte durch (abhängig davon, wie lange Sie warten möchten).

Messen Sie diese Größen für $N = 16$, $L = 8$ und bei zwei verschiedenen "Anfangstemperaturen" $T(0) = 8$ und $T(0) = 0.01$.

Als Lösung Plots der Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ einschicken für $T(0) = 8$ und $T(0) = 0.01$.

Versuchen Sie, dass System in einen flüssigen und/oder festen Zustand zu bringen, indem Sie für $T(0) = 5$ die Systemgröße L schrittweise erniedrigen für festes $N = 16$ (Dichteerhöhung). Benutzen Sie die Paarkorrelationsfunktion, um den flüssigen (oder festen) Zustand zu erkennen.

Als Lösung Plots der Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ einschicken für eine Temperatur in der flüssigen bzw. festen Phase.