Prof. Jan Kierfeld
jan.kierfeld@tu-dortmund.de

Sommersemester 2016
Technische Universität Dortmund

Computational Physics
Übungsblatt 5

Ausgabe: 13.05.2016 Abgabe: 27.05.2016

Aufgabe 1. 2D Lennard-Jones Fluid (40 (+5) P.)

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

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

(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 $h = 0.01$ (oder kleiner bei hohen Temperaturen) zur Integration.

a) Initialisierung:

Setzen Sie $N = 16$ Teilchen zu Beginn auf Plätze $\boldsymbol{r}(0) = \frac{1}{8}(1 + 2n, 1 + 2m)L$ mit $n, m = 0, ..., 3$ in der Box $[0, L] \times [0, L]$. Wählen Sie die Anfangsgeschwindigkeiten so, dass $\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{v}_i(0) = 0$, 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/Äquilibrierung:

Starten Sie bei $T(0) = 1$. Berechnen Sie die Schwerpunktsgeschwindigkeit $\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{v}_i$ als Funktion der Zeit. Berechnen Sie die Temperatur $T(t)$ als Funktion der Zeit. Berechnen Sie die potentielle Energie $E_{\text{pot}}(t) = \sum_{i<j-1}^{N} V(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|)$ und die kinetische Energie $E_{\text{kin}}(t) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}\boldsymbol{v}_i^2$ als Funktion der Zeit. Nach wie vielen Zeitschritten äquilibriert Ihr System?

Als Lösung Plots der Observablen einschicken.

c) Messung:

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

Messen Sie die Größen für $N = 16$, $L = 8\sigma$ und bei drei verschiedenen "Anfangstemperaturen" $T(0) = 1$, $T(0) = 0.01$ und $T(0) = 100$. Welche Phasen erkennen Sie?

Als Lösung Plots der Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ einschicken.

d) Thermostat **(Bonus)**

Bauen Sie nun einen isokinetischen Thermostat in ihre Simulation ein, welcher dafür sorgt, dass die Temperatur konstant bleibt. Was passiert nun bei $T = 0.01$? Schauen Sie sich die potentielle, kinetische und Gesamtenergie während der Äquilibrierung an und messen Sie $g(r)$ an dem äquilibrierten System. Es kann auch interessant sein sich Snapshots, also Bilder der Konfiguration des Systems, anzuschauen.

Als Lösung Plots der Energien und der Paarkorrelationsfunktion einschicken.