

# Modelekularna dinamika

Miha Čančula

8. april 2013

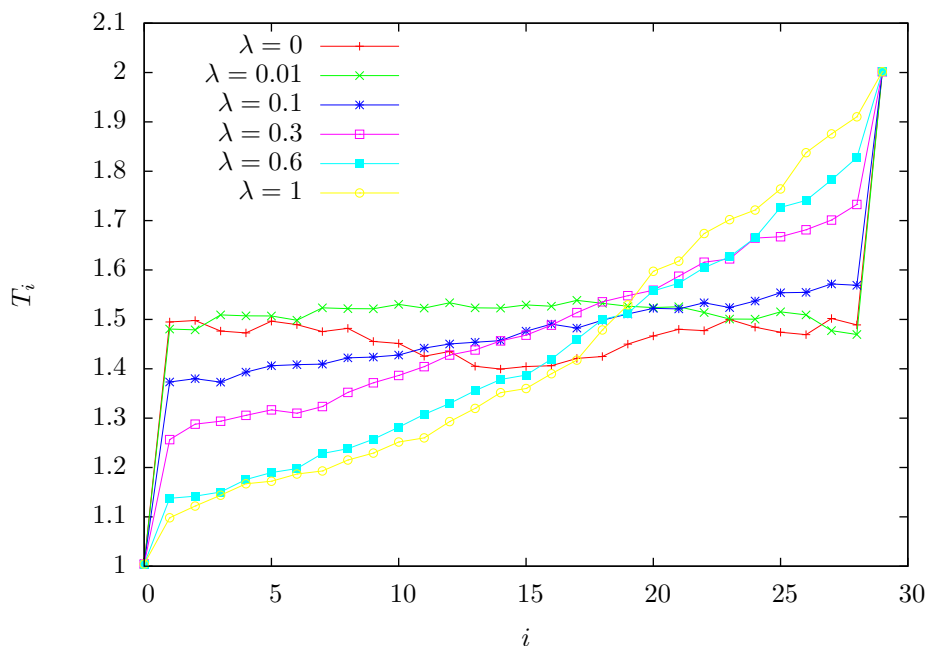
## 1 Transport toplote

Transport toplote sem preučeval z enodimenzionalno verigo oscilatorjev. Delca na koncih verige sem sklopil s toplotnima kopelima z brezdimenzijskima temperaturama  $T_L = 1$  in  $T_R = 2$ .

Zanimajo nas vrednosti v stacionarnem stanju, zato sem najprej napravil  $N_I = 10^8$  korakov integracije dolžine  $h = 10^{-2}$ . Nato sem izvedel še  $N_A = 10^7$  korakov, med katerimi sem opravil  $10^5$  meritev temperature in toplotnega toka. Meritve sem na koncu poprečil.

## 2 Maxwellske kopeli

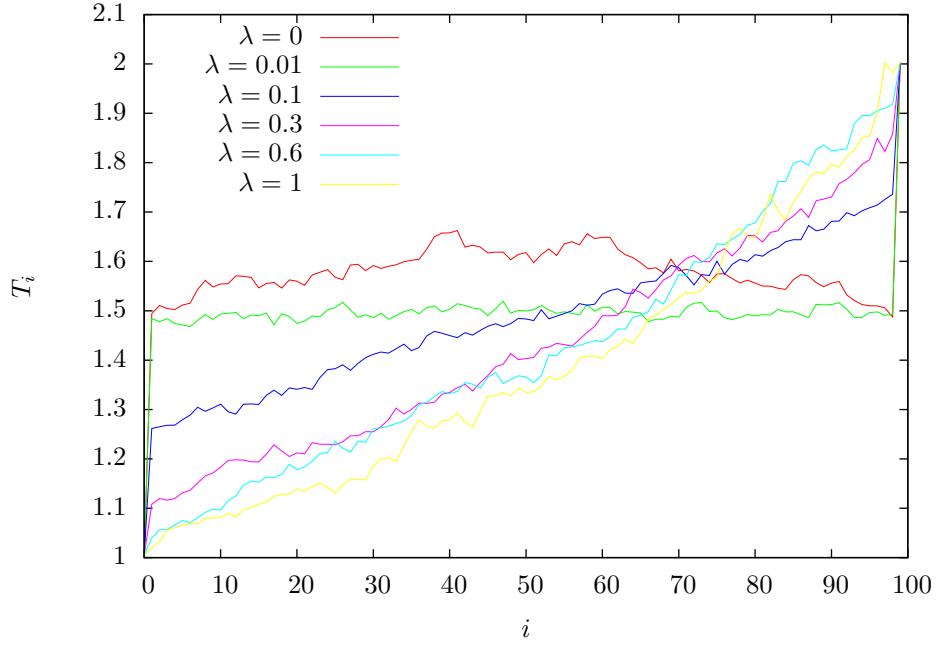
Najprej sem za modeliranje toplotnih kopeli uporabil Maxwellov algoritem, pri katerem gibalni količini sklopljenih delcev resetiramo vsakih  $R = 100$  korakov. Preizkušal sem različne vrednosti za  $R$ , najboljše pa se je izkazala takšna, pri kateri se reset zgodi enkrat vsako časovno enoto, torej  $Rh \sim 1$ . Med reseti sem stanje propagiral s simplektičnim integratorjem s simetrično shemo  $S_2$ .



Slika 1: Temperaturni profil v odvisnosti od parametra  $\lambda$  za sistem s 30 delci

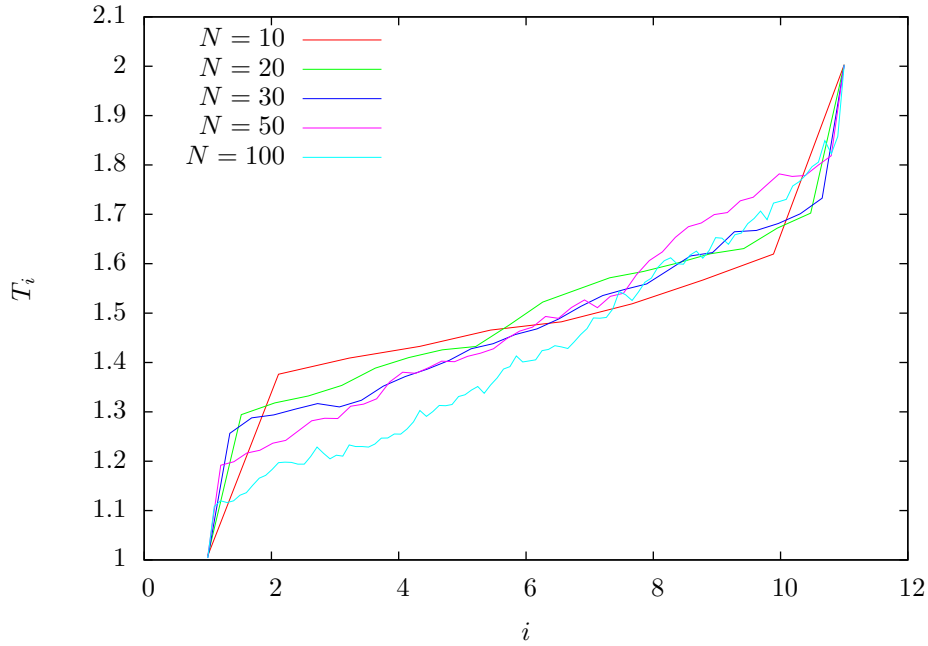
Že pri srednji velikosti sistema ( $N = 30$ ) opazimo odvisnost temperaturne porazdelitve od motnje  $\lambda$ . Veriga povsem harmoničnih oscilatorjev ( $\lambda = 0$ ) ima povsod, razen na obeh koncih, povprečno temperaturo. Pri  $\lambda$  nad 1 temperatura med obema koncema narašča linearно, brez skokov. Pri vmesnih vrednostih pa opazimo kombinacijo obeh pojavov: na koncih ima temperatura diskretne skoke, vmes pa narašča linearно.

Zelo podoben pojav opazimo tudi z večjim sistemom, na primer  $N = 100$  na spodnji sliki.



Slika 2: Temperaturni profil v odvisnosti od parametra  $\lambda$  za sistem s 100 delci

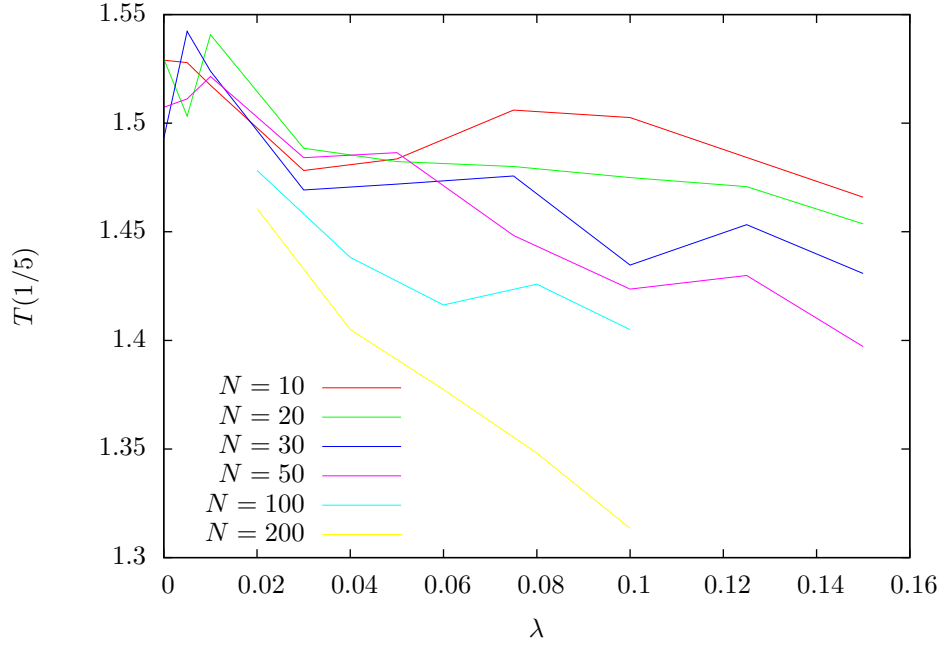
Za oceno termodinamske limite je zanimiva tudi odvisnost od velikosti sistema. Pri konstantnem parametru  $\lambda = 0.6$  pri večjem sistemu opazimo vedno manjše robne skoke.



Slika 3: Temperaturni profil pri fiksnem  $\lambda = 0.6$  in različnih velikostih sistema

Na prejšnjih slikah smo videli, da je temperaturni profil odvisen predvsem od motnje  $\lambda$ . Opazujemo lahko prehod med stanjem s konstantno temperaturo transportom ( $\lambda = 0$ ) in stanjem z linearnim profilom ( $\lambda = 1$ ). Z večanjem velikosti sistema  $N$  postanejo začetni skoki pri srednji  $\lambda$  vedno manj izraziti, zato domnevam, da v limiti  $N \rightarrow \infty$  nastane oster prehod med konstantnim in linearnim profilom.

Položaj prehoda sem poskušal najti tako, da sem opazoval temperaturo v točki na  $1/5$  verige v odvisnosti od  $\lambda$  in  $N$ . Rezultati so na spodnji sliki.



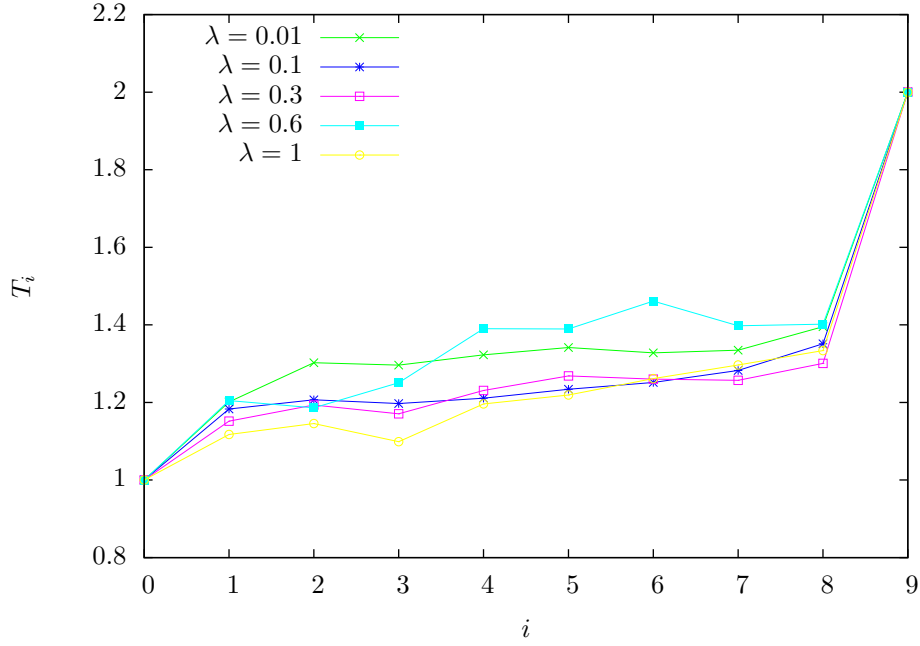
Slika 4: Iskanje faznega prehoda med konstantnim in linearnim profilom

Dokler je  $\lambda$  manjša od neke kritične vrednosti, ki je nekje okrog 0.01, temperatura ni odvisna niti od  $\lambda$  niti od  $N$ . Nad to mejo pa temperatura pada z  $\lambda$ , in to hitreje pri večjih  $N$ . To se sklada z domnevo, da v termodinamski limiti dobimo oster prehod. Na podlagi mojih izračunov mi ni uspelo določiti natančnega položaja prehoda, niti ne morem z gotovostjo trditi ali se ta zgodi pri  $\lambda = 0$  ali pri neki končni vrednosti.

Pri velikostih sistema  $N \leq 200$  je odvisnost od  $\lambda$  zvezna. Glede na to, da se z večanjem  $N$  strmina povečuje, bi lahko pričakovali, da pri termodinamskem  $N$  opazimo oster in nezvezen fazni prehod.

### 3 Nosé-Hooverjeve kopeli

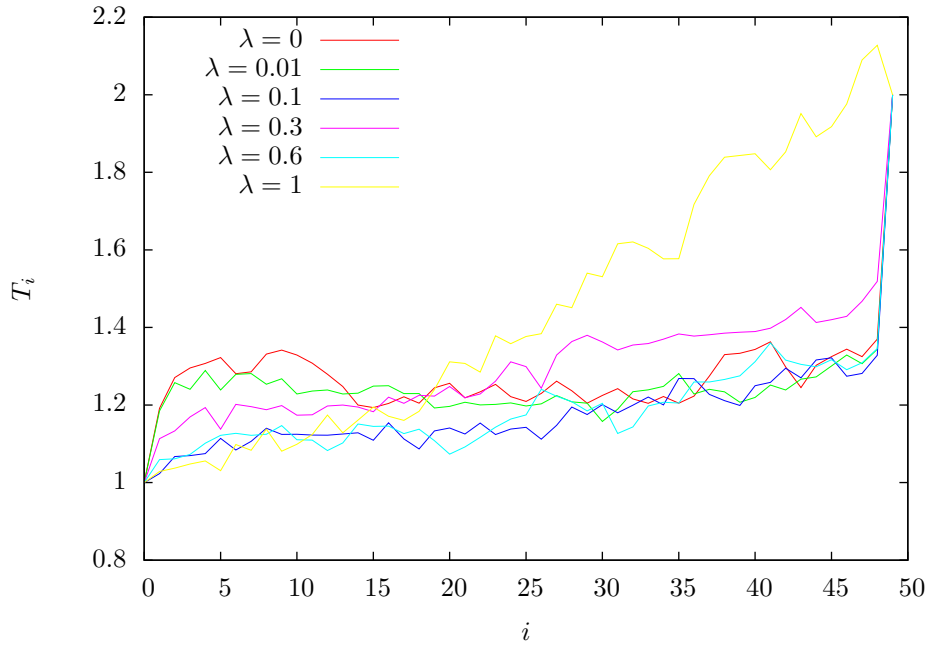
Pri uporabi Nosé-Hooverjevih kopeli sem imel težave predvsem pri iskanju pravega časa  $\tau$ . Pri enakem številu in dolžini korakov je bil račun z NH kopelmi bolj občutljiv glede na relaksacijski čas  $\tau$  kot Maxwelllov glede na interval resetiranja. Poskušal sem z različnimi vrednostmi, najboljše rezultate pa sem dobil s  $\tau \approx 1$ . Časovni razvoj sem simuliral z integratorjem RK4 knjižnice GSL.



Slika 5: Temperaturni profil v odvisnosti od parametra  $\lambda$  za sistem z 10 delci in  $\tau = 1$

Opazimo podoben vzorec kot z uporabo Maxwellskih kopeli. Razlika je največja pri majhnem  $\lambda$ , kjer sicer najdemo temperaturni plato, ki pa ima temperaturo nižjo od povprečja kopeli. Pri dovolj velike  $\lambda$  se vzpostavi pričakovan linearen profil temperature.

Rezultati za večjih sistem ( $N = 50$ ) so zelo podobni, le da je temperaturni plato pri majhnem  $\lambda$  še hladnejši.

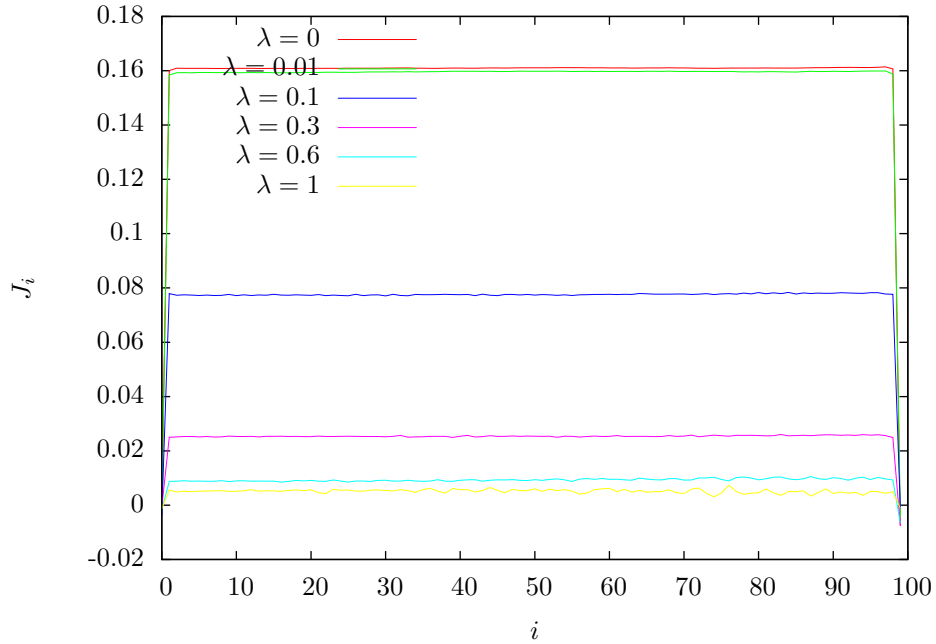


Slika 6: Temperaturni profil v odvisnosti od parametra  $\lambda$  za sistem s 50 delci in  $\tau = 1$

Pri pri majhnem  $\lambda$  opazimo tudi močno odvisnost od izbire  $\tau$ . Pri vrednosti  $\tau = 3$ , na primer, je plato dvignjen, medtem ko je pri  $\tau = 1$  spuščen. Glede na te rezultate bi dosti bolj zaupal algoritmu z naključnimi Maxwellskimi kopelmi.

## 4 Toplotni tok

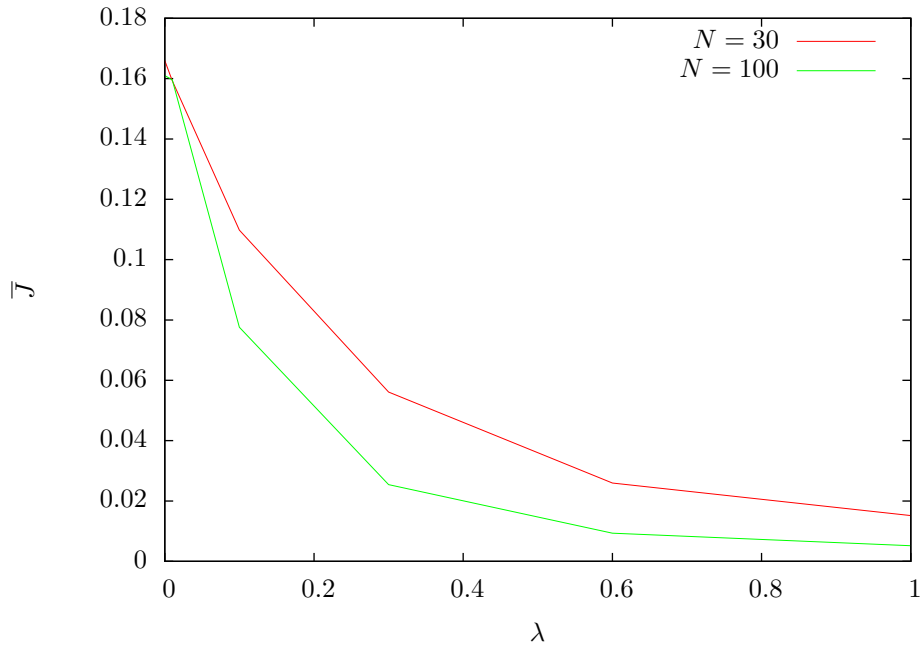
V vseh primerih sem poleg lokalne temperature računal tudi toplotni tok. Uporabil sem le Maxwellske kopeli, ker so pri računanju temperature dale boljše rezultate.



Slika 7: Toplotni tok v odvisnosti od parametra  $\lambda$  za sistem s 100 delci

Pri vseh vrednosti  $\lambda$  opazimo konstanten tok po celotni verigi. To je seveda pričakovano, saj se v stacionarnem stanju toplota nikjer ne zadržuje. Je pa tok skozi sistem močno odvisen od  $\lambda$ .

Ker je lokalni tok neodvisen od položaja v verigi, so bolj nazorni grafi odvisnosti povprečnega toka od  $\lambda$  in od  $N$ .

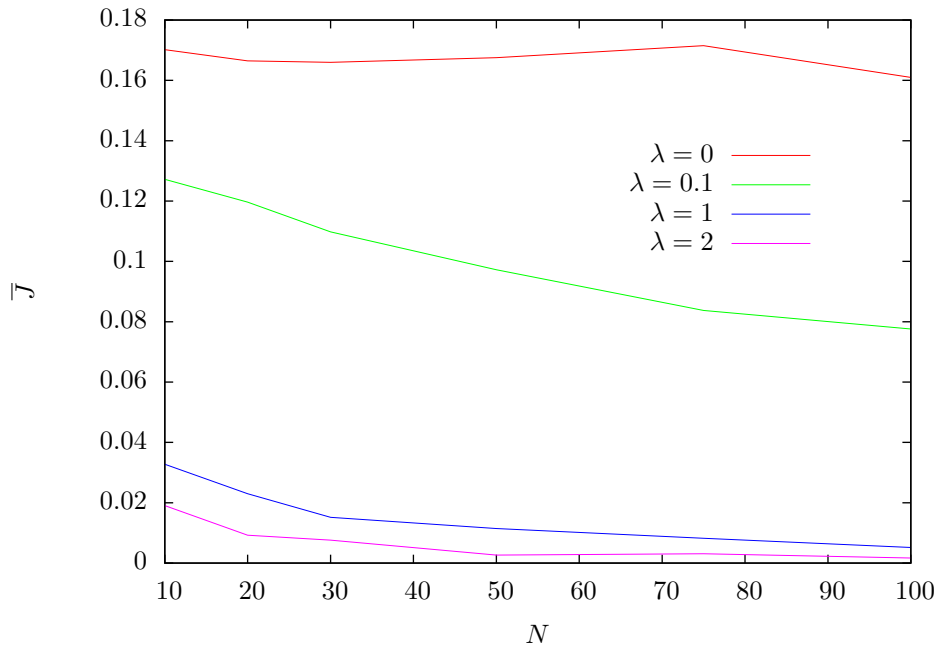


Slika 8: Odvisnost povprečnega toplotnega toka od  $\lambda$  pri različnih velikostih sistema

Po pričakovanju opazimo upadanje skupnega toka z večanjem  $\lambda$ . Pri nelinearnem sistemu pride do sipanja

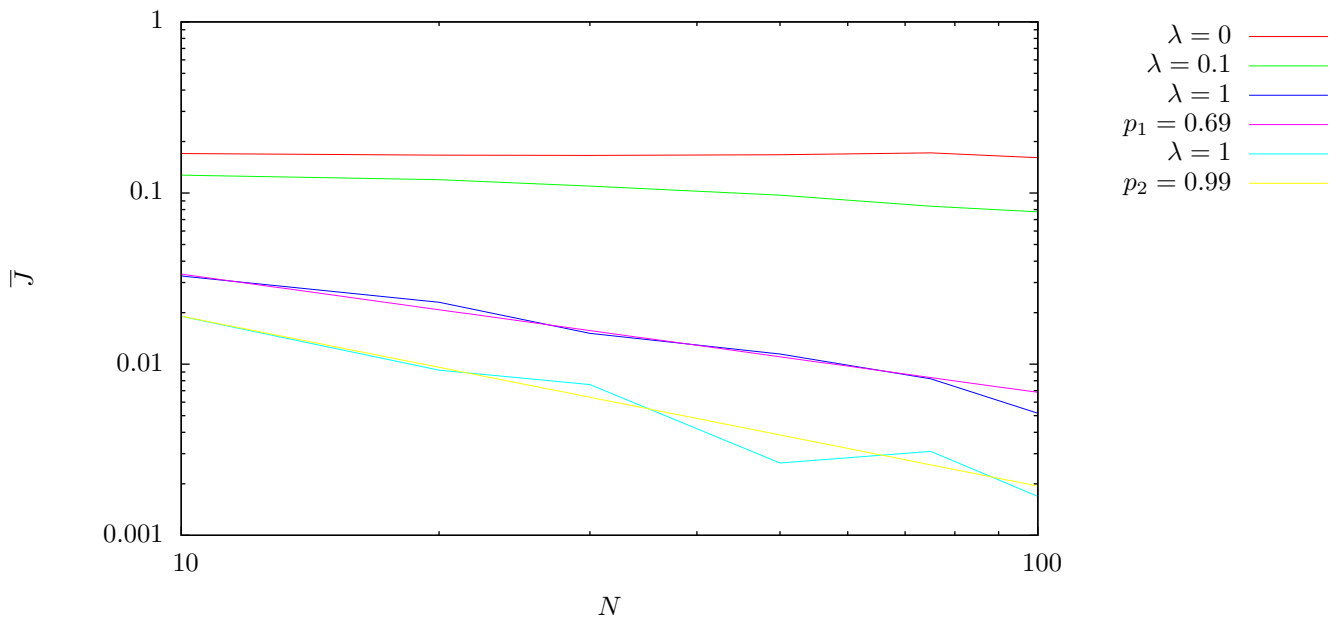
med fononi, zaradi česar je transport manj učinkovit.

Bolj pomembna je verjetno odvisnost toka od velikosti sistema  $\bar{J}(N)$ , zlasti če je ta potenčna  $\bar{J} \propto N^{-p}$ .



Slika 9: Odvisnost povprečnega toplotnega toka od velikosti sistema pri različnih  $\lambda$

Pri  $\lambda = 0$  je tok neodvisen od velikosti, torej imamo balistični transport z eksponentom  $p = 0$ . Z večanjem  $\lambda$  pa začne tok padati z  $N$ , kar nakazuje difuzijski transport. Vrednost eksponenta pa lažje določimo z logaritemskim grafom.



Slika 10: Odvisnost povprečnega toplotnega toka od velikosti sistema pri različnih  $\lambda$

Prilagajanje premice da rezultat  $p \approx 0.7$  za  $\lambda = 1$ . To je še vedno manj od vrednosti 1 pri normalnem difuzijskem transportu. Pri nadaljnjem povečevanju  $\lambda$ , na primer do 2, pa eksponent  $p$  doseže pričakovano vrednost 1.