

Report

**Molekular-Dynamik von weichen
Teilchen**

Sebastian Eibl

11. November 2012

Friedrich Alexander Universität Erlangen-Nürnberg

Inhaltsverzeichnis

1	Simulation eines einzelnen Teilchens im harmonischen Potenzial	3
1.1	Analytische Lösung	3
1.2	Numerische Lösung	4
2	Lennard-Jones-Flüssigkeit in 2D	8
2.1	Das Lennard-Jones-Potential	8
2.2	Simulation	10
2.3	Komplexität	10
3	Weiche repulsive Teilchen in 2D in periodischer Simulationsbox	12
4	Bestimmung der Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion	13
5	Diffusion des Lennard-Jones-Fluids	14
6	Molekular-Dynamik bei fester Temperatur	15

1 Simulation eines einzelnen Teilchens im harmonischen Potenzial

Um sich mit dem Simulationsframework vertraut zu machen, wird zuerst ein einzelnes Teilchen im harmonischen Potential simuliert. Die Simulation erfolgt dabei nur in einer Dimension auf der x-Achse. Das verwendete Potential hat die Form

$$V(x) = \frac{1}{2}\epsilon x^2 \quad (1.1)$$

Die daraus resultierende Kraft auf ein Teilchen an der Position x lässt sich wie folgt beschreiben:

$$F(x) = -\frac{\partial}{\partial x}V(x) = -\epsilon x \quad (1.2)$$

1.1 Analytische Lösung

Für den Fall, dass keine weiteren Kräfte auftreten, lässt sich folgende Bewegungsgleichung formulieren:

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad (1.3)$$

In dieser Gleichung wurde $\omega = \sqrt{\frac{\epsilon}{m}}$ eingeführt. Unter Verwendung der Startbedingungen $x_0 = A$ und $v_0 = 0$ ergibt sich die bekannte Lösung des harmonischen Oszillators, wobei x_0 die Startposition und v_0 die Startgeschwindigkeit beschreiben:

$$x(t) = A \cos(\omega t) \quad (1.4)$$

Eine detaillierte Herleitung ist zum Beispiel bei [\[Dem08, Kap. 11.1\]](#) zu finden. Führt man zusätzlich noch eine Reibungskraft der Form $F_R = -R\dot{x}$ ein, ergibt

sich folgende Differenzialgleichung:

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega^2 x = 0 \quad (1.5)$$

Dabei wurde $\gamma = \frac{R}{2m}$ gesetzt. Bei der Lösung dieser Differenzialgleichung gilt es drei Fälle zu unterscheiden.

$$\gamma < \omega, \text{ schwache Dämpfung} \quad x(t) = Ae^{-\gamma t} \cos(\omega t) \quad (1.6)$$

$$\gamma = \omega, \text{ aperiodischer Grenzfall} \quad x(t) = A(1 + \gamma t)e^{-\gamma t} \quad (1.7)$$

$$\gamma > \omega, \text{ starke Dämpfung} \quad x(t) = \frac{A}{\alpha} e^{-\gamma t} [\alpha \cosh(\alpha t) + \gamma \sinh(\alpha t)] \quad (1.8)$$

mit $\alpha = \sqrt{\gamma^2 - \omega^2}$. Die Lösungen entstehen durch Annahme der gleichen Anfangsbedingungen wie weiter oben beschrieben. Eine ausführliche Herleitung kann bei [Dem08, Kap. 11.3] nachvollzogen werden.

1.2 Numerische Lösung

Die eben hergeleiteten analytischen Lösungen sollen nun in der Simulation nachvollzogen werden. Dazu werden folgende Parameter gewählt:

- $\epsilon = 1$
- $m = 1$
- $A = 5.61231$

Die Bewegungsgleichung wird mit Hilfe des Eulerverfahrens

$$x_{t+\Delta t} = x_t + \dot{x}_t \Delta t \quad (1.9)$$

$$\dot{x}_{t+\Delta t} = \dot{x}_t + \ddot{x}_t \Delta t \quad (1.10)$$

diskret in Δt Schritten integriert. Zuerst werden die Auswirkungen unterschiedlicher Δt auf die Trajektorie untersucht. Für unterschiedliche Δt lassen sich in Abbildung 1.1 auf der nächsten Seite deutliche Unterschiede in der Trajektorie feststellen. Für kleinere Δt stimmt der Verlauf besser mit dem theoretisch vorausgesagten überein. Dies ist nicht verwunderlich, da eine feinere zeitliche Diskretisierung zu kleineren numerischen Fehlern führt. Um die

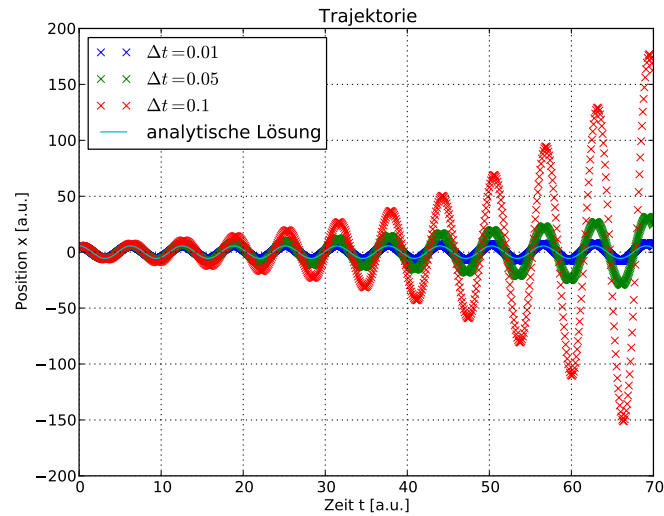


Abbildung 1.1: Aufgetragen ist die Position des Teilchens gegen die Zeit. Es zeigt sich, dass das gewählte Δt signifikanten Einfluss auf die Trajektorie hat. Eine feiner zeitliche Diskretisierung führt zu einem Ergebnis, das näher an der analytischen Lösung liegt.

Energieerhaltung des Eulerverfahrens zu überprüfen, wird die Energie ebenfalls aufgezeichnet. Die Energieerhaltung ist beim Eulerverfahren nur schlecht gegeben, was man am Divergieren der Energie in Abbildung 1.2 auf der nächsten Seite erkennen kann. Das Eulerverfahren eignet sich also nur bedingt zur Integration von Bewegungsgleichungen, da die Energieerhaltung in der Physik ein fundamentales Prinzip darstellt. Die Fehler können durch eine feinere zeitliche Diskretisierung verbessert, aber nicht verhindert werden. Für die Fälle mit Dämpfung zeigt sich ein ähnliches Bild.

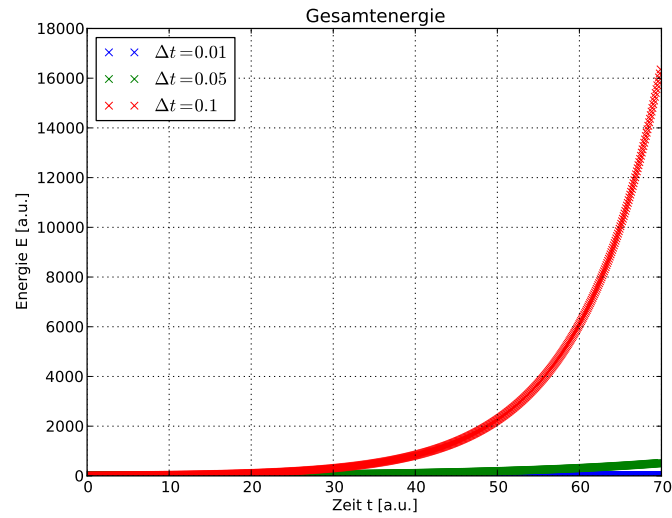


Abbildung 1.2: Aufgetragen ist die gesamte Energie des Teilchens gegen die Zeit. Es zeigt sich, dass die Energieerhaltung des Eulerverfahrens sehr schlecht ist.

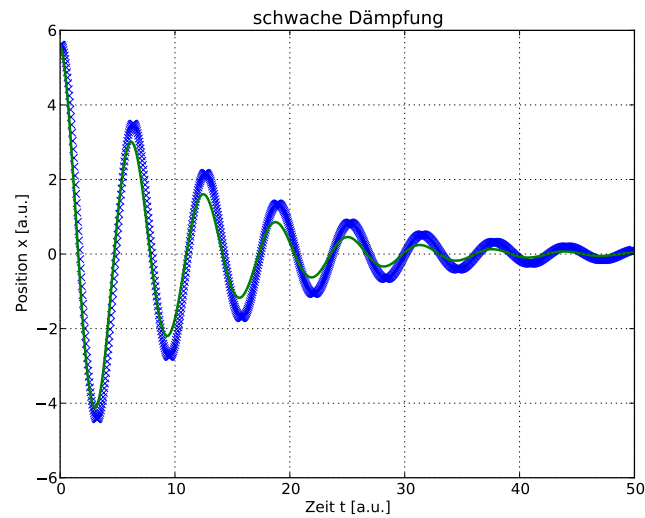


Abbildung 1.3: Harmonischer Oszillator mit schwacher Dämpfung. $\gamma = 0.1\omega$. Die simulierte Trajektorie (blau) weicht leicht von der theoretischen Erwartung (grün) ab.

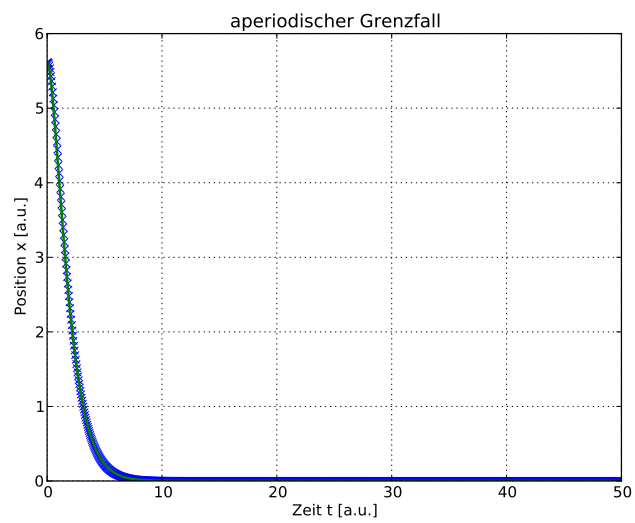


Abbildung 1.4: Harmonischer Oszillator im aperiodischen Grenzfall. $\gamma = \omega$.

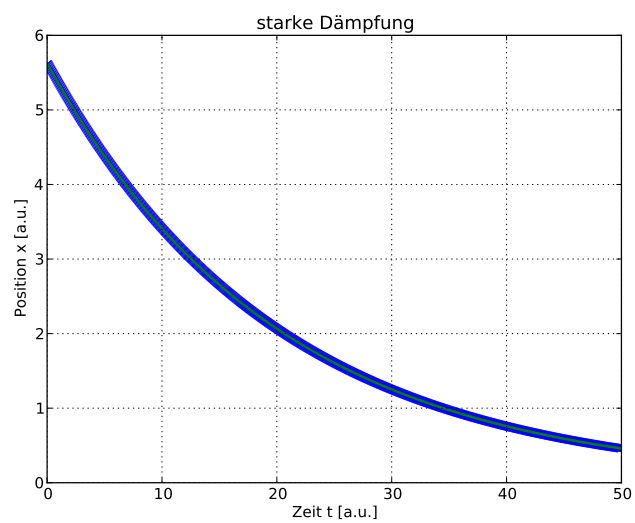


Abbildung 1.5: Harmonischer Oszillator mit starker Dämpfung. $\gamma = 10\omega$.

2 Lennard-Jones-Flüssigkeit in 2D

2.1 Das Lennard-Jones-Potential

Nun wird die Simulation auf mehrere Teilchen erweitert. Diese Teilchen befinden sich nicht mehr in einem äußeren Potential sondern wechselwirken mit sich selbst. Das Potential, das jedes von jedem Teilchen an seiner Position erzeugt wird, wird mit Hilfe des Lennard-Jones-Potentials genähert. Da das Lennard-Jones-Potential kugelsymmetrisch ist (keine Richtung wird von den Teilchen bevorzugt) lässt es sich in Abhängigkeit von r , dem Abstand zum Teilchen, darstellen. Das Lennard-Jones-Potential ist wie folgt definiert:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.1)$$

Das Minimum des Lennard-Jones-Potentials befindet sich bei $r_c = 2^{\frac{1}{6}}\sigma$. Dies entspricht einer Energie von $E_{min} = V(r_c) = -\epsilon$. Die dazugehörige Kraftwirkung erhält man durch Differenzieren:

$$F(\vec{r}) = -\nabla V(\vec{r}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.2)$$

ϵ und σ sind charakteristische Größen für das Lennard-Jones-Potential, wobei ϵ eine Energie darstellt und σ eine Länge. Dies wird in Abbildung 2.1 und 2.2 dargestellt. Wie in den Diagrammen zu erkennen ist, macht es Sinn, alle Einheiten in der Simulation im Bezug auf σ und ϵ anzugeben. Dies wird damit erreicht, dass in der Simulation σ und ϵ gleich 1 gesetzt werden.

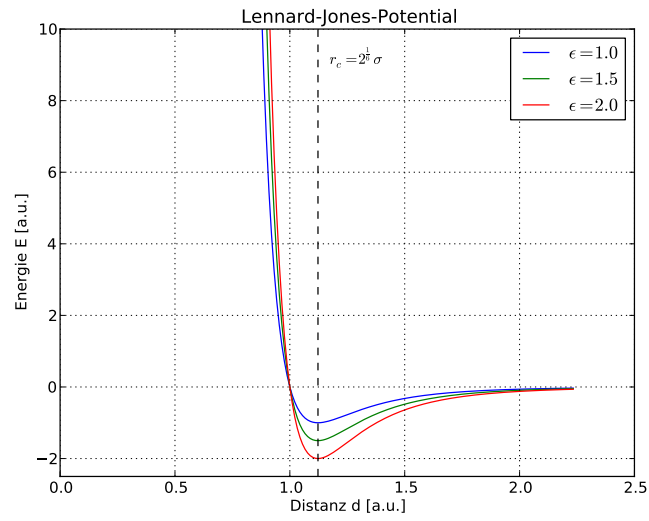


Abbildung 2.1: Verlauf des Lennard-Jones-Potentials in Abhängigkeit der Entfernung. Es zeigt sich, dass ϵ eine charakteristische Energie darstellt.

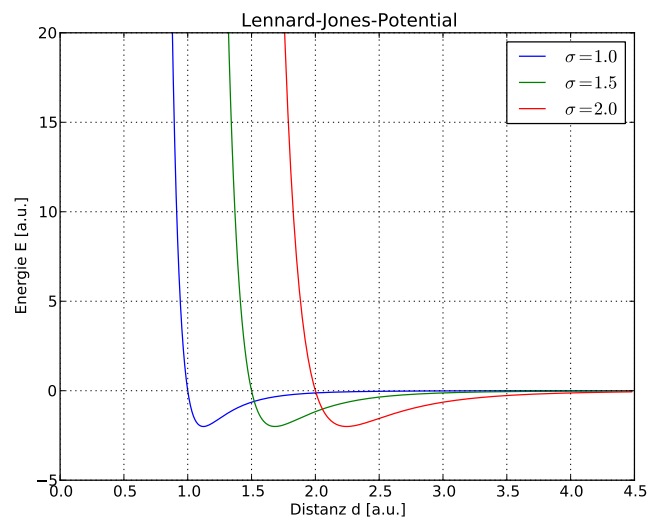


Abbildung 2.2: Verlauf des Lennard-Jones-Potentials in Abhängigkeit der Entfernung. Es zeigt sich, dass σ eine charakteristische Länge darstellt.

2.2 Simulation

Es wird nun eine 2D-Simulation geschrieben, die den zeitlichen Verlauf der Position und der Geschwindigkeit, von N Teilchen ermittelt. Dazu werden die Teilchen zu Beginn auf einem quadratischen Gitter oder einem Dreiecksgitter angeordnet (vgl. Abbildung 2.3). Es zeigt sich, dass sich die quadratische

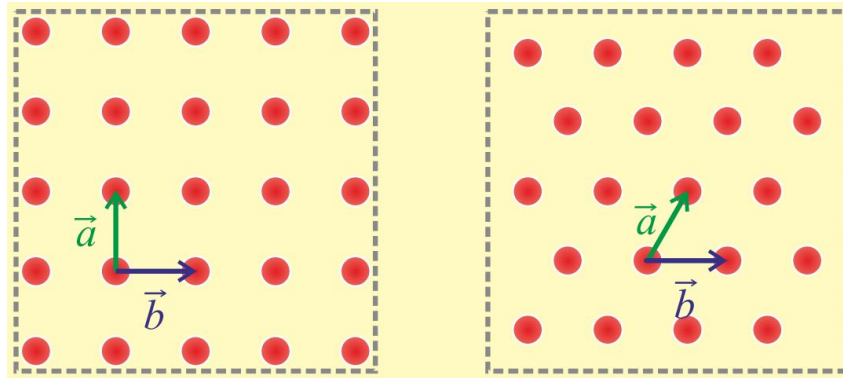


Abbildung 2.3: Quadratische (links) und dreieckige (rechts) Anordnung der Teilchen zu Beginn der Simulation. Ausschnitt übernommen aus [SH12].

angeordneten Teilchen sofort in Richtung der Dreiecksstruktur orientieren. Dies lässt darauf schließen, dass die Dreiecksstruktur energetisch günstiger ist, als die quadratische. Für große Zeiten expandiert das System, da die Energie, wie in Kapitel 1.2 auf Seite 4 gesehen, aufgrund von numerischen Fehlern stetig ansteigt.

2.3 Komplexität

Um die Komplexität der Simulation zu ermitteln, werden mehrere Simulationen mit unterschiedlicher Teilchenzahl durchgeführt. Alle anderen Parameter bleiben dabei unverändert. Es wird die Zeit für jeden Integrationsschritt gemessen und ein Mittelwert aus 100 Schritten gebildet. Anschließend wird an die so gewonnen Daten ein Polynom angefitet, um die Komplexität zu bestimmen. Für das Polynom ax^3+bx^2+cx+d ergeben sich folgende Werte: $a = 8,652\,893\,54 \times 10^{-3}$, $b = 9,318\,410\,92 \times 10^1$, $c = 8,075\,047\,05 \times 10^3$ und $d = 7,967\,686\,47 \times 10^5$. Es

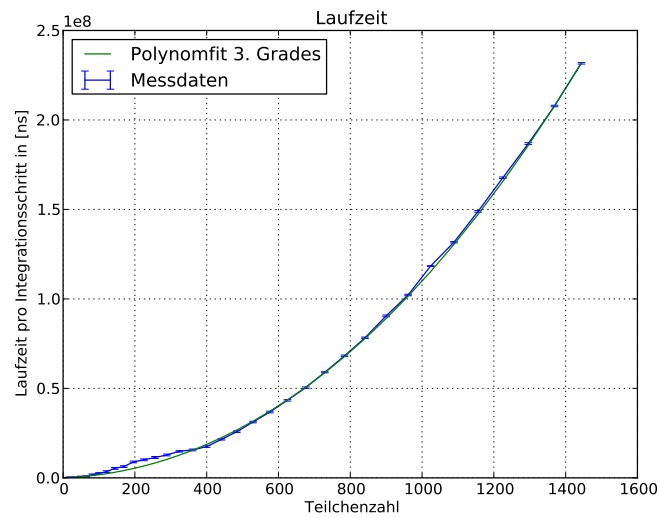


Abbildung 2.4: Laufzeit in Anhängigkeit von der Teilchenzahl mit polynomialen Fit. Es zeigt sich eine N^2 Abhängigkeit.

zeigt sich, dass die 3. Ordnung vernachlässigbar ist. Somit lässt sich schließen, dass das Programm eine Komplexität von $O(N^2)$ aufweist.

3 Weiche repulsive Teilchen in 2D in periodischer Simulationsbox

4 Bestimmung der Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion

5 Diffusion des Lennard-Jones-Fluids

6 Molekular-Dynamik bei fester Temperatur

Literaturverzeichnis

- [Dem08] DEMTRÖDER, Wolfgang: *Experimentalphysik 1: Mechanik und Wärme*. 5., neu bearb. u. aktualisierte Aufl. Springer, 2008. – ISBN 3540792945
- [Rap04] RAPAPORT, D. C.: *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. 2. Cambridge University Press, 2004. – ISBN 0521825687
- [SH12] SCHRÖDER-TURK, Gerd ; HOFFMANN, Matthias: *Übungsblatt 1 – Molekular-Dynamik von weichen Teilchen (Computerphysik II)*. Friedrich Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, 2012