

## Vorschlag zur Benennung und Format der Parmeter

### Positionen:

Position: N x 3 Array

Array mit N Zeilen und 3 Spalten. In jeder Zeile i stehen die x-, y- und z-Koordinaten des Teilchens i.

$$Positions = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_N & y_N & z_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{r}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{r}_N \end{pmatrix}$$

### Geschwindigkeiten:

Velocities: N x 3 Array

Array mit N Zeilen und 3 Spalten. In jeder Zeile i stehen die x-, y- und z-Komponenten der Geschwindigkeit des Teilchens i.

$$Velocities = \begin{pmatrix} v_{x_1} & v_{y_1} & v_{z_1} \\ v_{x_2} & v_{y_2} & v_{z_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ v_{x_N} & v_{y_N} & v_{z_N} \end{pmatrix}$$

### Kräfte:

Forces: N x 3 Array

Array mit N Zeilen und 3 Spalten. In jeder Zeile i stehen die x-, y- und z-Komponenten der Kraft die auf Teilchen i wirkt.

$$Forces = \begin{pmatrix} F_{x_1} & F_{y_1} & F_{z_1} \\ F_{x_2} & F_{y_2} & F_{z_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ F_{x_N} & F_{y_N} & F_{z_N} \end{pmatrix}$$

### Labels:

Labels: N x N\_Labels Array

Array mit N Zeilen und N\_Labels Spalten. In jeder Zeile i stehen wichtige Parameter des Teilchens i, die sich im Laufe der Zeit nicht verändern. Hierzu gehören die Massen  $m_i$ , die Ladungen  $q_i$ , sowie ein Parameter der auf die Teilchensorte schließen lässt  $label_i$ .

$$Labels = \begin{pmatrix} m_1 & q_1 & label_1 & \cdots & ?_1 \\ m_2 & q_2 & label_2 & \cdots & ?_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_N & q_N & label_N & \cdots & ?_N \end{pmatrix}$$

Da ich nicht weiß wie viele Parameter dieser Art noch Auftauchen habe ich N\_Labels und die noch kommenden Einträge  $?_i$  unbestimmt gelassen. Hier wäre es sinnvoll diese Matrix am Anfang einmalig bei der Initialisierung zu generieren.

### Lennard Jones Parameter (LJP):

Die LJP müssen für jede mögliche Kombination aus Teilchensorten die miteinander Wechselwirken berechnet werden. Es wäre sinnvoll dies einmalig, vor dem Start der Simulation zu tun und die Ergebnisse wie folgt abzuspeichern:

$\sigma$ :

sigma: 1 x 3 Array

Array mit 3 Einträgen. Jeder Eintrag steht für den LJP  $\sigma$  einer möglichen Paarung zweier Teilchensorten.

$$sigma = (\sigma_{AA} \quad \sigma_{AB} \quad \sigma_{BB})$$

Hier ist  $\sigma_{KL}$  der zu verwendende LJP für die Interaktion von Teilchensorte K mit Teilchensorte L.

Diese Struktur wird nützlich wenn die oben genannten *labels* die Werte 0 oder 1 bekommen. Man muss nur die *labels* addieren und erhält den richtigen Index des Arrays sigma.

$\epsilon$ :

epsilon: 1 x 3 Array

Array mit 3 Einträgen. Jeder Eintrag steht für den LJP  $\epsilon$  einer möglichen Paarung zweier Teilchensorten.

$$epsilon = (\epsilon_{AA} \quad \epsilon_{AB} \quad \epsilon_{BB})$$

Hier ist  $\epsilon_{KL}$  der zu verwendende LJP für die Interaktion von Teilchensorte K mit Teilchensorte L.

Dieses Format gilt nur wenn wir nicht mehr als 2 Teilchensorten im System vorhanden sind. Ich würde Vorschlagen das Upgrade für beliebig viele Teilchensorten in die Zukunft zu verschieben.

### Nachbarlisten:

Neighbors: List

Liste mit N Einträgen. Neighbors[i] sollte einen Array ausgeben mit den Indizes aller Teilchen, die sich innerhalb des Cutoff-Radius von Teilchen i befinden.

So kann man einfach über den ausgegebenen Array eine for-Schleife laufen lassen und berücksichtigt nur die richtigen Teilchen.

### Basisvektoren des Reziproken Raums $\mathbf{k}$ :

K: N\_k x 3 Array

Array mit N\_k Zeilen und 3 Spalten. In jeder Zeile i stehen die Einträge des i-ten Vektors des Fourier Raums  $\mathbf{k}_i$ .

$$K = \begin{pmatrix} \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{k}_{N_k} \end{pmatrix}$$

Da das long-range Potential und die long-range Kraft im reziproken Raum schnell abfallen, müssen wir ein paar Tests machen, um  $N_k$  zu bestimmen.

### Skalarproduktmatrix SPM:

SPM:  $N_k \times N$  array

Array mit  $N_k$  Zeilen und  $N$  Spalten. In jedem Eintrag  $SPM_{ij}$  steht das Skalarprodukt aus  $\mathbf{k}_i$  und  $\mathbf{r}_j$ .

$$SPM = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1 \rangle & \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{r}_2 \rangle & \dots & \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{r}_N \rangle \\ \langle \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_1 \rangle & \langle \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2 \rangle & \dots & \langle \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \mathbf{k}_{N_k}, \mathbf{r}_1 \rangle & \langle \mathbf{k}_{N_k}, \mathbf{r}_2 \rangle & \dots & \langle \mathbf{k}_{N_k}, \mathbf{r}_N \rangle \end{pmatrix}$$

Diese Matrix brauchen wir um den Strukturfaktor  $S(\mathbf{k})$  schnell berechnen zu können. Sowohl für die Potentiale (Gleichung 15) als auch für die Kräfte (Kap 10.3) muss man  $S(\mathbf{k})$  über  $\mathbf{k}$  aufsummieren. Zudem ist  $S(\mathbf{k}) = \sum_{a=1}^N q_a * \exp(i * \langle \mathbf{k}, \mathbf{r}_a \rangle)$ .

Die Bemerkungen in runden Klammern beziehen sich auf das Vorlesungsskript.