

Übungsblatt 8 – Cerberus

Aufgabe 1

a) Initialisierung

Zu Beginn werden die Orte und Geschwindigkeiten der Teilchen in einer $[0, L] \cdot [0, L]$ Box initialisiert. Dabei werden zufällige Startgeschwindigkeiten im Bereich $[0, 10]$ gewählt. Zusätzlich wird die Schwerpunktsbewegung der Teilchen auf Null gesetzt. Um die Geschwindigkeiten entsprechend der Temperatur umskalieren zu können, wird folgende Rechnung betrachtet:

$$\begin{aligned} T_0 &= \frac{2}{k_B N_f} \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} \\ &= \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^N (v_x^2 + v_y^2) \\ &= \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^N (a^2 \tilde{v}_x^2 + a^2 \tilde{v}_y^2) \\ &= a^2 \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^N (\tilde{v}_x^2 + \tilde{v}_y^2) \\ &= a^2 \tilde{T}. \end{aligned}$$

Aus ihr folgt, dass die Geschwindigkeiten mit

$$\frac{1}{a} = \sqrt{\left(\frac{\tilde{T}}{T}\right)}$$

skaliert werden müssen.

b) Äquilibration

Die Dynamik des Systems wird nun mithilfe des Geschwindigkeits-Verlet-Algorithmus ermittelt. Die dabei benötigte Beschleunigung der einzelnen Teilchen ergibt sich aufgrund normierter Massen von 1 direkt aus der Kraft, welches sich wiederum aus dem Lennard-Jones Potential

$$\begin{aligned} \vec{F}_i &= \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij} = - \sum_{i \neq j} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \frac{\vec{r}_{ij} + L\vec{n}}{|\vec{r}_{ij} + L\vec{n}|} V'(|\vec{r}_{ij} + L\vec{n}|) \\ \text{Cutoff } r_c &= \frac{1}{2}L < |\vec{r}_{ij} + L\vec{n}| \\ \vec{F}(\vec{r}) &= -\vec{\nabla} V(r) = -24 \frac{\vec{r}}{r^2} \left[2 \left(\frac{1}{r} \right)^{-12} - \left(\frac{1}{r} \right)^{-6} \right] \end{aligned}$$

ergibt. Dabei stellt der Cutoff r_c sicher, dass ein Teilchen i nur einmal mit einem (Bild)Teilchen j wechselwirkt.

Die während der Äquilibration ergeben sich die Schwerpunktsgeschwindigkeit \vec{v}_S , die Temperatur T , die potentielle und die kinetische Energie (E_{pot} , E_{kin}) mithilfe von

$$\begin{aligned}\vec{v}_S &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \\ E_{\text{pot}} &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \\ E_{\text{kin}} &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \vec{v}_i^2 \\ T &= \frac{2}{N_f} E_{\text{kin}}\end{aligned}$$

berechnet.

Diese genannten Größen werden in Abbildung 2, 3 und 1 dargestellt. Da sich die Temperatur aus der kinetischen Energie berechnet, zeigen sie denselben Verlauf.

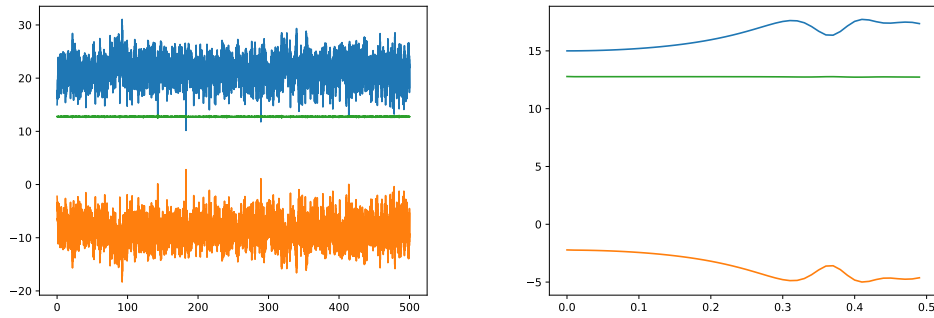


Abbildung 1: $T_0 = 1 \varepsilon$.

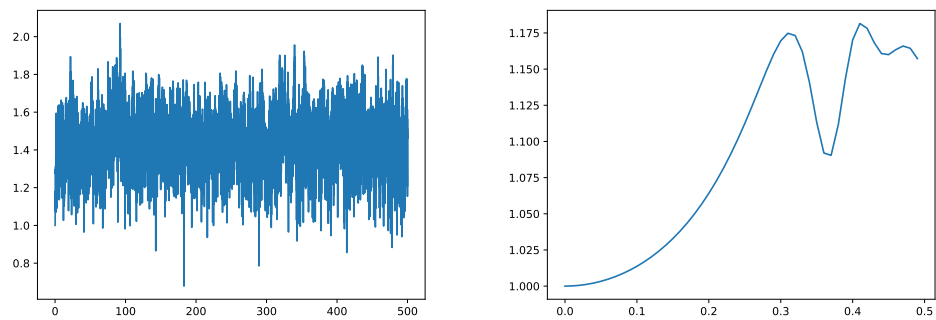


Abbildung 2: $T_0 = 1 \varepsilon$.

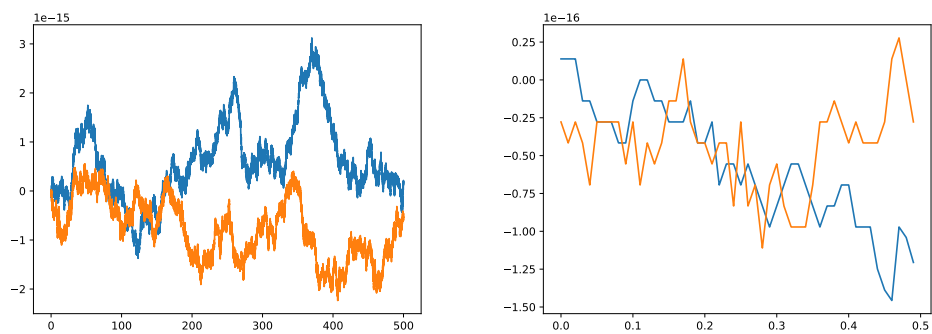


Abbildung 3: $T_0 = 1 \varepsilon$.

d) Thermostat

Der Übergabewert `thermostat` an die Funktion `md_simulation` legt fest, ob ein isokinetischer Thermostat in das System eingebaut werden soll. Ist dies der Fall, werden nach jedem Schritt die Geschwindigkeiten so skaliert, dass das System wieder auf der initialen Temperatur gehalten wird. In Abbildung ?? ist der Verlauf der Energien während der Äquilibrierungsphase für $T_{\text{init}} = 0.01$ dargestellt. Durch die Anpassung der Geschwindigkeiten gilt keine Energieerhaltung mehr und die potentielle Energie wird im Laufe der Zeit minimiert.

Da die Temperatur recht klein gewählt ist, bewegen sich die Teilchen nicht viel und sollten eine periodische Anordnung einnehmen. In Abbildung ?? ist die Konfiguration nach der Messung dargestellt. Es zeigt sich, dass kleinere Muster erkennbar sind. Dies spricht für eine feste Phase der Teilchen.

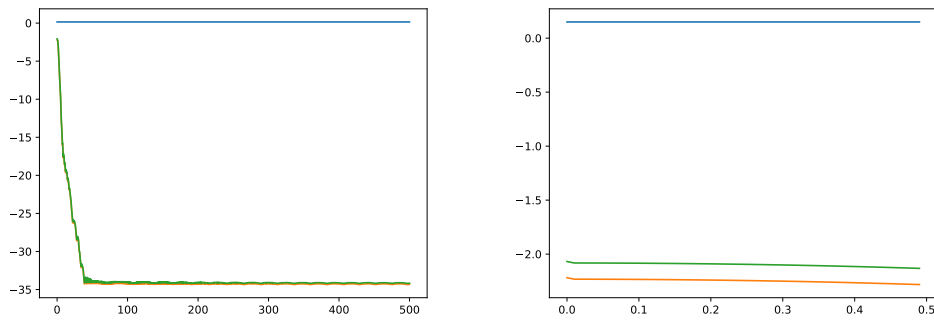


Abbildung 4: $T_0 = 1 \varepsilon$.