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:

$$
\begin{aligned}
T_0 &= \frac{2}{k_\mathrm{B} N_\mathrm{f}} \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_\mathrm{i}^2}{2m_\mathrm{i}} \\
&= \frac{1}{N_\mathrm{f}} \sum_{i=1}^{N} \left(v_\mathrm{x}^2 + v_\mathrm{y}^2\right) \\
&= \frac{1}{N_\mathrm{f}} \sum_{i=1}^{N} \left(a^2 \tilde{v}_\mathrm{x}^2 + a^2 \tilde{v}_\mathrm{y}^2\right) \\
&= a^2 \frac{1}{N_\mathrm{f}} \sum_{i=1}^{N} \left(\tilde{v}_\mathrm{x}^2 + \tilde{v}_\mathrm{y}^2\right) \\
&= a^2 \tilde{T}.
\end{aligned}
$$

Aus ihr folgt, dass die Geschwindigkeiten mit

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

skaliert werden müssen.

b) Äquilibrierung

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

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

ergibt. Dabei stellt der Cutoff r_c sicher, dass ein Teilchen i nur einmal mit einem (Bild)Teilchen j wechselwirkt.
Die während der Äquilibrierung ergeben sich die Schwerpunktsgeschwindigkeit $\vec{v}_\mathrm{S}$, die Temperatur T, die potentielle und die kinetische Energie (E_pot, E_kin) mithilfe von

$$
\begin{aligned}
\vec{v}_\mathrm{S} &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\vec{v}_\mathrm{i} \\
E_\mathrm{pot} &= \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N} V(|\vec{r}_\mathrm{i}-\vec{r}_\mathrm{j}|) \\
E_\mathrm{kin} &= \sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}\vec{v}_\mathrm{i} \\
T &= \frac{2}{N_\mathrm{f}}E_\mathrm{kin}
\end{aligned}
$$

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.

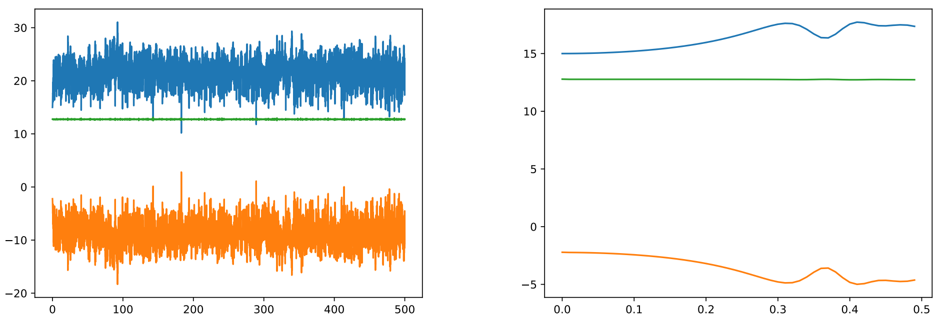

Abbildung 1: $T_0 = 1\,\varepsilon$.

$1 \cdot 10^{-15}$.

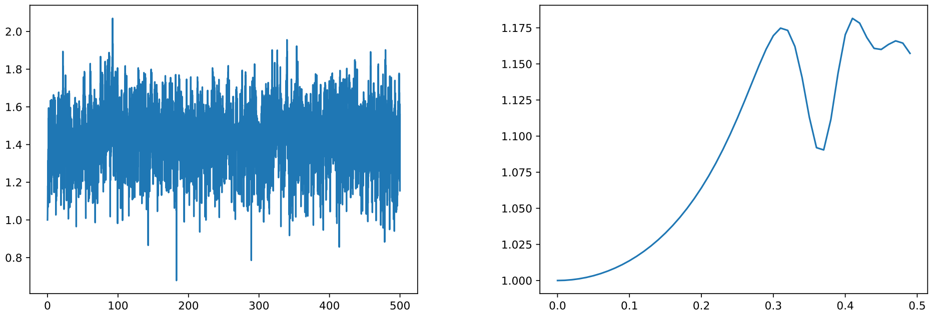

Abbildung 2: $T_0 = 1\,\varepsilon$.

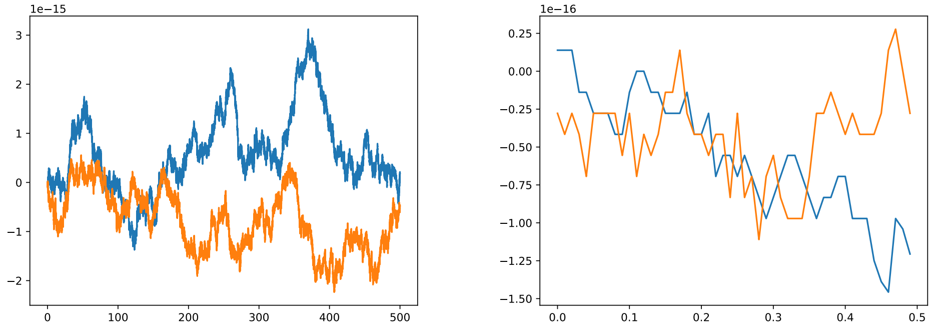

Abbildung 3: $T_0 = 1\,\varepsilon$.