

Übungsblatt 8 – Cerberus

Aufgabe 1

a) Initialisierung

Zu Beginn werden die Orte und Geschwindigkeiten der Teilchen in einer $[0, L] \times [0, L]$ 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.

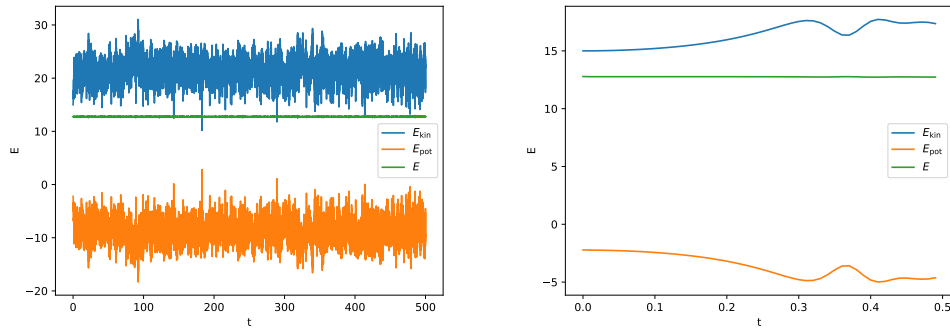


Abbildung 1: Energieverlauf der Äquilibrationsphase bei $T_0 = 1 \epsilon$.

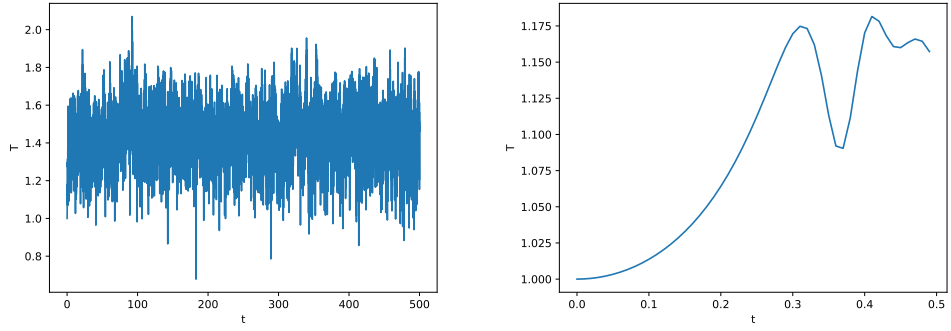


Abbildung 2: Temperaturverlauf der Äquilbrierungsphase bei $T_0 = 1 \varepsilon$.

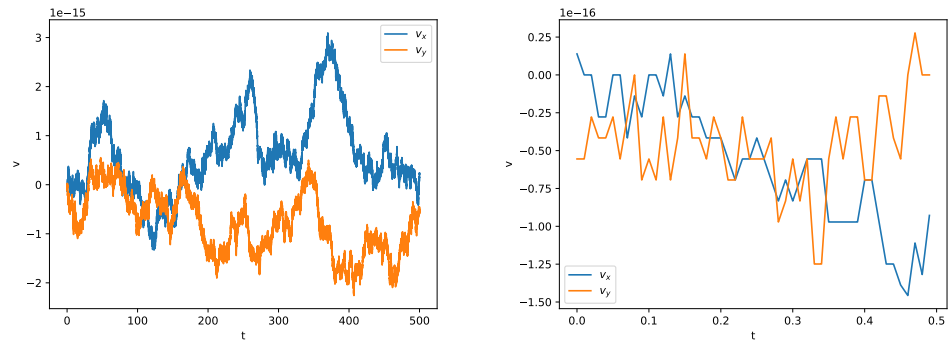


Abbildung 3: Geschwindigkeitsverlauf der Äquilbrierungsphase bei $T_0 = 1 \varepsilon$.

c) Messung

Die Mittelung der Temperaturen nach $5 \cdot 10^5$ Schritten ergibt für die jeweiligen Temperaturen:

$$T1: 1.4791 \pm 0.1287 \quad (1)$$

$$T2: 0.6993 \pm 0.1206 \quad (2)$$

$$T3: 96.3769 \pm 4.6857 \quad (3)$$

$$(4)$$

In den Abbildungen 4 bis 6 sind die zeitlichen Verläufe der Temperatur bei verschiedenen Starttemperaturen dargestellt.

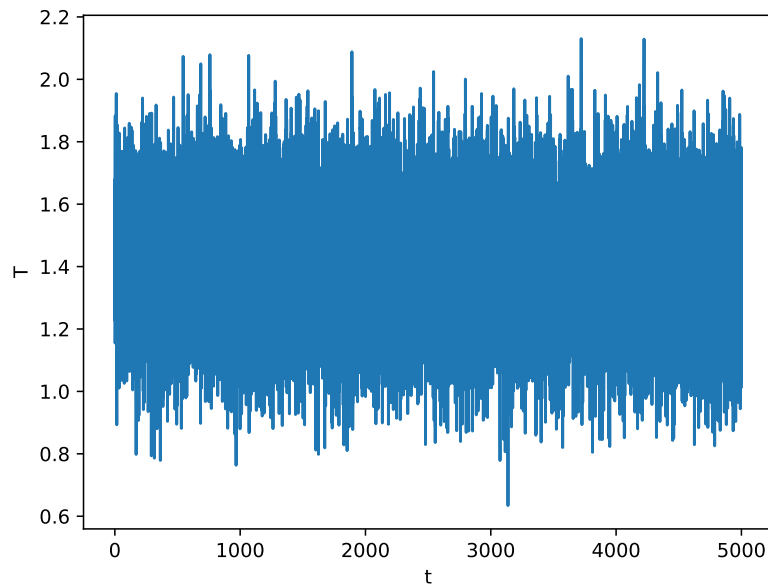


Abbildung 4: Temperaturverlauf der Messung bei $T_0 = 1 \varepsilon$.

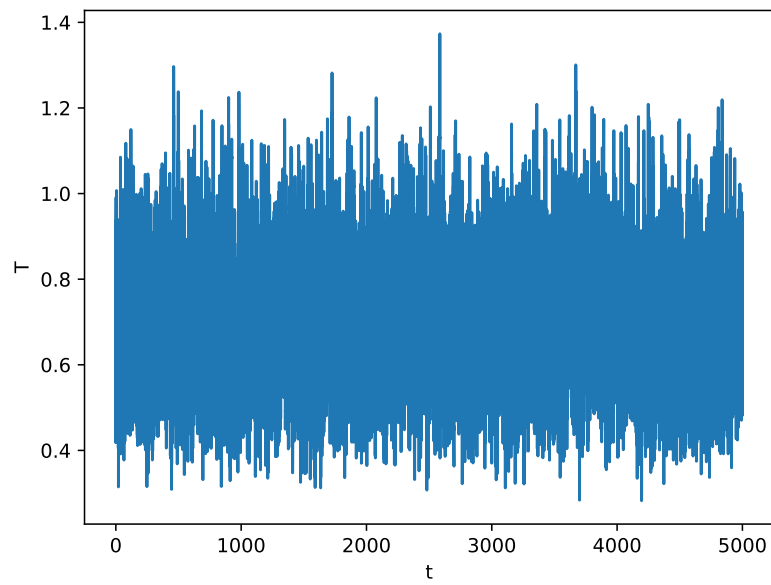


Abbildung 5: Temperaturverlauf der Messung bei $T_0 = 100 \varepsilon$.

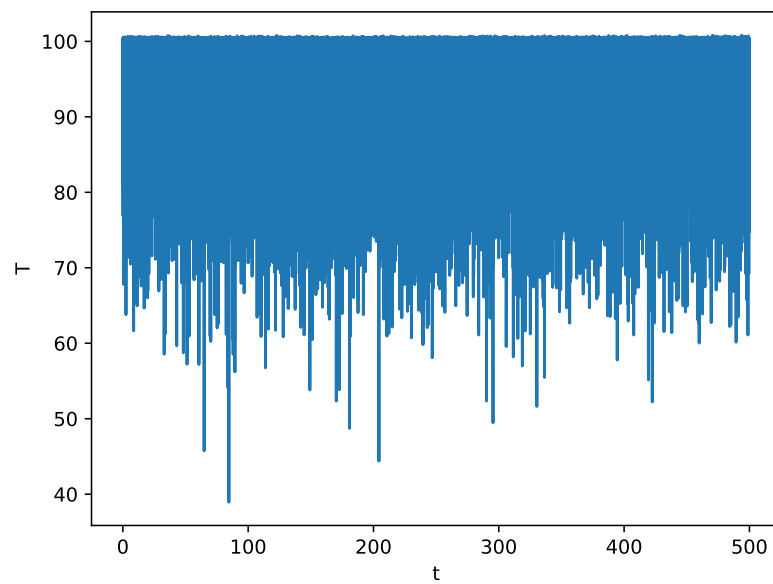


Abbildung 6: Temperaturverlauf der Messung bei $T_0 = 0.01 \varepsilon$.

d) Thermostat

Für den Fall, dass ein isokinetisches Thermostat verwendet wird, werden nach jedem Schritt die Geschwindigkeiten so skaliert, dass das System wieder die Ursprungstemperatur gehalten wird. Der Verlauf der Energien während der Äquilibrierungsphase für $T_0 = 0.01$ ist in Abbildung 7 dargestellt.

Da die Temperatur recht klein gewählt ist, bewegen sich die Teilchen nicht viel und sollten eine periodische Anordnung einnehmen.

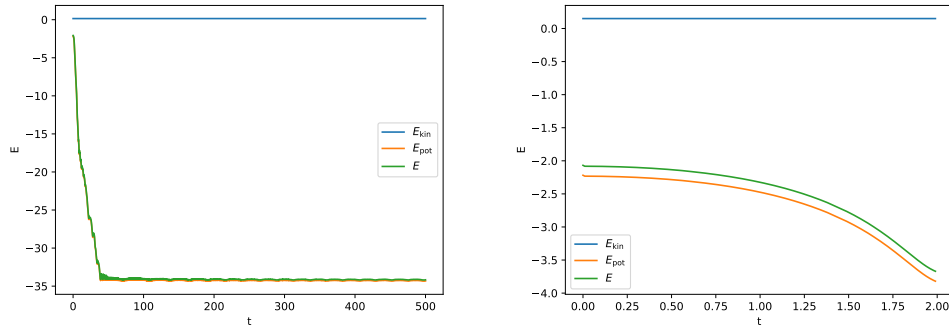


Abbildung 7: Temperaturverlauf der Messung bei $T_0 = 0.01 \varepsilon$.