

# Übungsblatt 8 – Cerberus

## Aufgabe 1

Die Simulationen wurden folgende Einstellungen verwendet, sofern nicht anders gekennzeichnet:

- $N = 16$
- $r_c = \frac{L}{2}$
- $h = 0,01$
- $k_B = 1$
- $m_i = 1 \quad \forall i = 1, \dots, N$
- Anzahl Freiheitsgrade  $N_f = 2N - 2$

Längen werden zudem in Einheiten von  $\sigma$  und Zeiten in Einheiten von  $\tau$  gemessen. Energien und  $k_B T$  werden in Einheiten von  $\varepsilon$  gemessen.

### a) Initialisierung

Zu Beginn werden die Orte und Geschwindigkeiten der Teilchen initialisiert. Dabei werden die Teilchen auf einem Gitter innerhalb der Box  $[0, L] \cdot [0, L]$  verteilt.

Die Geschwindigkeiten werden mit Zufallszahlen im Bereich von  $[0, 10]$  initialisiert. Physikalisch interessante Prozesse betreffen jedoch die Relativgeschwindigkeiten der Teilchen untereinander, sodass die Schwerpunktsbewegung der Teilchen auf Null gesetzt wird. Um mit einer beliebigen Temperatur  $\tilde{T}$  zu starten, werden die Geschwindigkeiten der Teilchen anschließend skaliert. Die initiale Temperatur berechnet sich nach

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

mit den anfangs genannten Bedingungen. Daraus ergibt sich, dass die Geschwindigkeiten mit dem Faktor

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

skaliert werden müssen.

## b) Äquilibration

Nach der Initialisierung wird die Dynamik des Systems unter Verwendung des Geschwindigkeits-Verlet-Algorithmus ermittelt. Während einer Äquilibrationsphase nehmen die Teilchen einen natürlichen Zustand ein, der sich bei Temperaturen  $\neq 0$  stark von der Gittersymmetrie unterscheidet.

Die Beschleunigung der einzelnen Teilchen ergibt sich aufgrund normierter Massen von 1 direkt aus der Kraft. Die Kraft auf das Teilchen  $i$  berechnet sich wiederum aus dem Lennard-Jones Potential nach

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

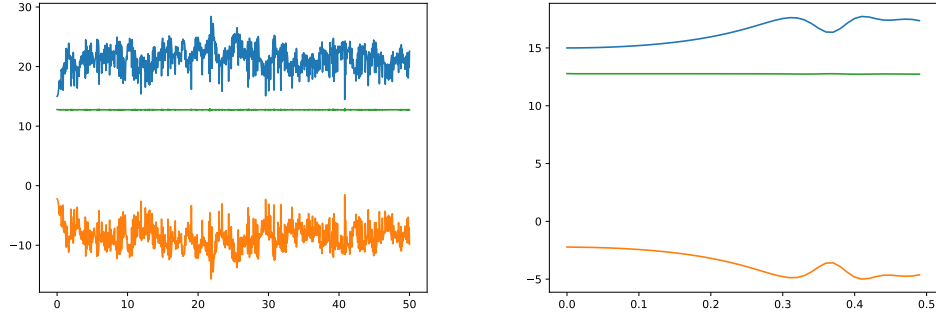
Der Cutoff  $r_c$  ist genau so gesetzt, dass ein Teilchen  $i$  nur einmal mit  $j$  wechselwirkt, also entweder mit dem realen Teilchen  $j$  oder mit dem nächstgelegenen Bildteilchen  $j$ . Ist ein Bildteilchen  $j$  näher als  $\frac{L}{2}$  am Teilchen  $i$ , so muss das reale Teilchen sowie alle anderen Bildteilchen weiter als  $\frac{L}{2}$  entfernt sein.

Während der Äquilibration wurden die Schwerpunktsgeschwindigkeit  $\vec{v}_S$ , die Temperatur  $T$ , die potentielle und die kinetische Energie ( $E_{\text{pot}}$ ,  $E_{\text{kin}}$ ) in Abhängigkeit von der Zeit berechnet. In jedem Zeitschritt ergeben sich diese nach

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

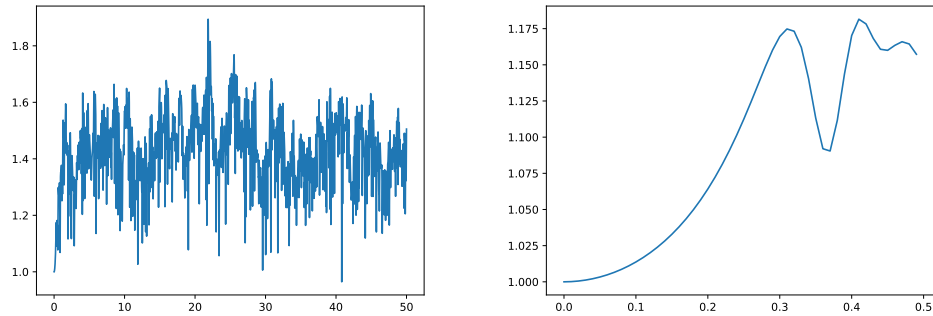
mit den anfangs genannten Bedingungen.

In der Abbildung 1 ist der Energieverlauf während der Äquilibration dargestellt. Hierbei zeigt sich die Eigenschaft der Gesamtenergieerhaltung des Verlet-Algorithmus. Kinetische und Potentielle Energie fluktuieren hauptsächlich um ihren Mittelwert, sodass eine Äquilibrationsphase nur schwer aus zu machen ist. In den ersten Zeitschritten sinkt die potentielle Energie, während die kinetische Energie etwas zunimmt.



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

Die Temperatur während der Äquilibration ist in Abbildung 2 dargestellt. Da sich die Temperatur aus der kinetischen Energie berechnet, zeigt sie den selben Verlauf.



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

Schließlich ist in den Abbildung 3 die Schwerpunktgeschwindigkeit während der Äquilibration dargestellt. Da bei der Initialisierung diese auf Null gesetzt wurde, verändert sie sich auch nicht im Laufe der Zeit und fluktuiert lediglich im numerischen Limit von  $1 \cdot 10^{-15}$ .

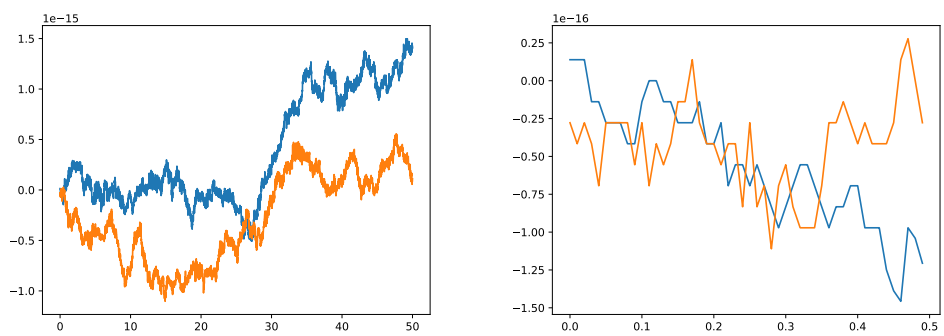


Abbildung 3:  $T_0 = 1 \varepsilon$ .