

Fragen

24. Juni 2016

1 Temperature Relaxation by Stochastic Dynamics

1.1 Mean square components

Im Paper auf S. 120. letzte Zeile steht, dass das quadratische Mittel sich zu $2m_i\gamma_i k_B T_0$ auswertet, wobei m_i die Masse, γ_i der Reibungskoeffizient des i-ten Atoms und T_0 die Referenztemperatur des Waermebades ist. Wie komme ich auf die Formel?

1.2 NVT ensemble

Auf S.121 nach Formel 32 steht, dass die Trajektorie, die durch die Integration der Langevin Bewegungsgleichung erzeugt wird, zu einer kanonischen Verteilung der Mikrozustände führt. Was ist die kanonische Verteilung der Mikrozustände? Ein kanonisches Ensemble? Warum führt die Integration der Langevin Bewegungsgleichung zu einer kanonischen Verteilung der Mikrozustände?

1.3 Properties of Langevin Equation

Auf S.121, zweiter Absatz steht, dass die Geschwindigkeitstrajektorie der Langevin Gleichung verfuegbar und stetig ist. Wie sieht die Geschwindigkeitstrajektorie aus und warum hat sie diese Eigenschaften?

Ausserdem soll die Trajektorie nicht deterministisch sein. Warum?

1.4 stochastic boundary conditions

Auf S 121 wird von stochastischen Randbedingungen gesprochen. Was sind das? Ich habe leider keine gute Erklärung gefunden.

1.5 setting friction coefficients to zero

Auf S. 121 wird geschrieben, dass, falls man alle Reibungskoeffizienten auf Null setzt, auch die stochastische Kraft auf Null gesetzt wird. Ich verstehe nicht, warum.

1.6 choice of γ_i

Im Text auf S 121 wird gesagt, dass, falls man den Reibungskoeffizienten proportional zur Masse setzt, die Störung des dynamischen Systems durch die stochastischen Kräfte am geringsten wird. Warum ist dies so?

1.7 Umformung der Formeln

Ich verstehe auf S. 122 die Umformung der meisten Formeln nicht.

2 Temperature Relaxation by Stochastic Coupling

Kurze Einführung: Wir wollen Kollisionen von Atomen mit einem Wärmebad simulieren. Dazu wählen wir nach einer bestimmten Verteilung Atome aus, deren Geschwindigkeit nach der Maxwell-Boltzmann Verteilung neu gesetzt wird.

2.1 Wählen wann ein Atom eine neue Geschwindigkeit bekommt

Wir müssen bestimmen wann die Atome eine neue Temperatur bekommen sollen. Dazu gibt es zwei Wege. Der erste ist nach einer bestimmten Wkeit, die $p(\tau) = \alpha \exp -\alpha\tau$ ist. Der zweite Weg soll einfacher sein. Ich verstehe nicht, warum dieser Weg einfacher sein soll.

Bei Formel 39 wird die Wkeitsverteilung angegeben, wann ein Atom eine neue Geschwindigkeit bekommt. Die Herleitung der Wkeitsverteilung ist leider nicht angegeben. Wie komme ich auf diese Formel?

Auch von Formel 41 gibt es keine Herleitung. Intuitiv sind mir einige Terme der Formel klar, jedoch nicht die genaue Zusammensetzung. Könnten Sie mir die Formel genauer erklären?

2.2 Begriff: interne/externe Freiheitsgrade

u.a. auf S.124 oben (und an anderen Stellen) tauchen die Begriffe interne und externe Freiheitsgrade auf. Was sind interne/ externe Freiheitsgrade? Haben Sie ein Beispiel?

2.3 Veraenderung der kinetischen Energie

Im Text wird gesagt, dass jede Kollision die kinetische Energie des Systems um $\frac{3}{2}k_B(T_0 - T)$ veraendert. Wie kommt man auf diesen Wert?

2.4 Formelzeichen

Bei Formel 42 wird das Formelzeichen c_ν benutzt. Wofuer steht c_ν ?