

# Molecular Dynamics Simulation

Marco Stumper und Alexander Walter

Universität Hamburg

January 22, 2014



Universität Hamburg

DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

# Molecular Dynamics

## 1 Molecular Dynamics

- Simulation
- Potential

## 2 Die Simulation

- Code
- Initialisierung
- Ein paar Plots

## 3 Resultate

- Aggregatzustände
- Noch Mögliches

# Erklärung

## Grundlegendes

- Es befinden sich  $N$  Partikel in einer 3D Box mit Seitenlängen  $L$
- Dichte  $\rho = N/L^3$

# Erklärung

## Grundlegendes

- Es befinden sich  $N$  Partikel in einer 3D Box mit Seitenlängen  $L$
- Dichte  $\rho = N/L^3$

## Initialisierung

- Die Partikel werden an zufälligen Orten platziert (Optional in einem Kasten)
- Die Box hat periodic boundary conditions

# Erklärung

## Grundlegendes

- Es befinden sich  $N$  Partikel in einer 3D Box mit Seitenlängen  $L$
- Dichte  $\rho = N/L^3$

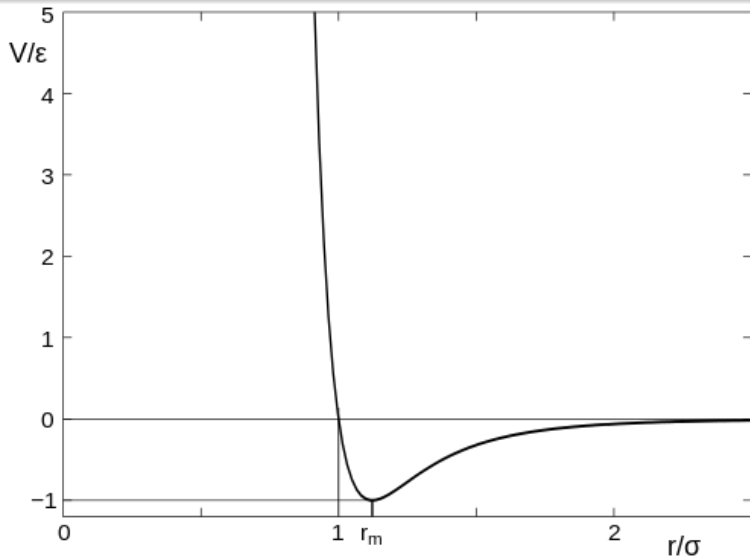
## Initialisierung

- Die Partikel werden an zufälligen Orten platziert (Optional in einem Kasten)
- Die Box hat periodic boundary conditions

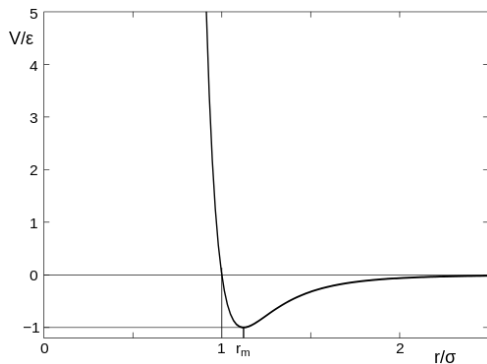
## Simulation

- Ein Simulationsschritt wird mit Hilfe von 2 Arrays berechnet
- Wir verwenden das Lennard-Jones Potential

# Lennard-Jones-Potential

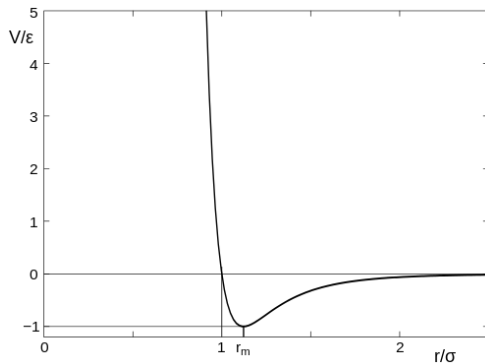


# Lennard-Jones-Potential



- $V(r) = V_0(r^{-12} - r^{-6})$

# Lennard-Jones-Potential



- $V(\infty)=0$ ,  $V(0)=\infty$
- EPSILON ist die Tiefe des Potentialtopfes
- Minimum bei  $r_m=2^{1/6}$

- $V(r) = V_0(r^{-12} - r^{-6})$



# Observablen

## Simulation

- Die Energie wird über die Geschwindigkeit berechnet
- Wir verwenden das Lennard-Jones Potential

# Code Aufbau



# Code Aufbau



# Code Aufbau

Eingabe



# Code Aufbau

## Eingabe

- 
- 

## Ausgabe

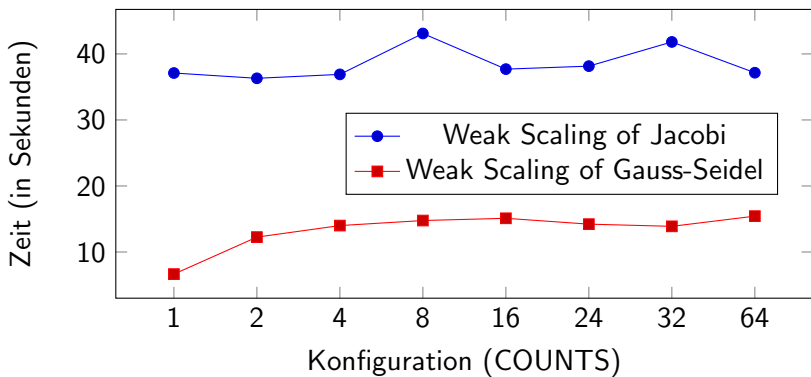
- 
-

# Erster Zustand

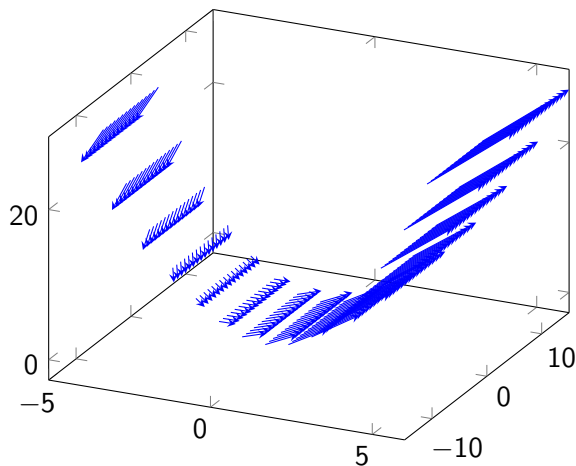
## Simulation

- Mit  $N$  Partikeln, Geschwindigkeit  $v$
- Zufällig in Raum  $x,y,z$  verteilt

# Plots

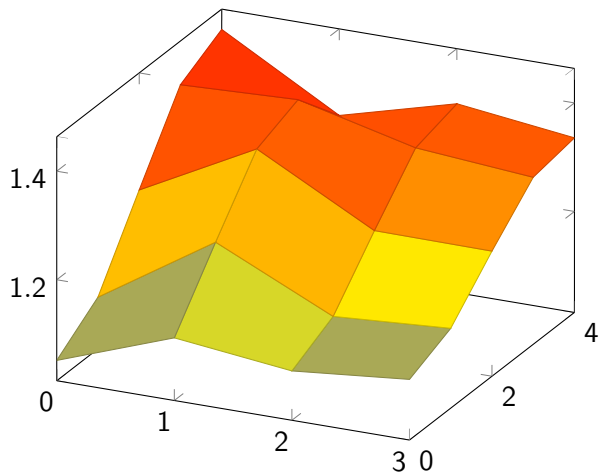


# Plots

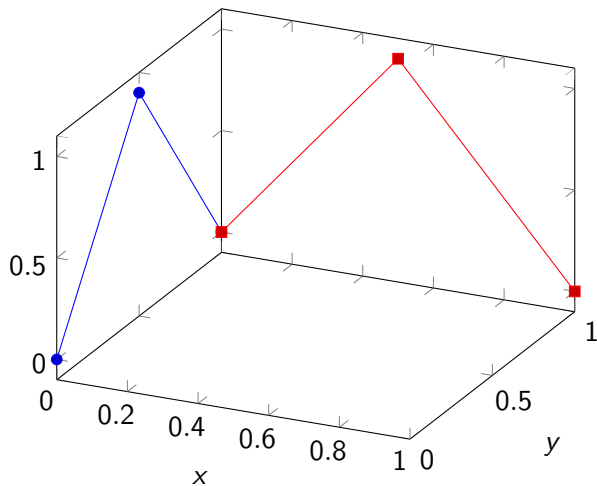




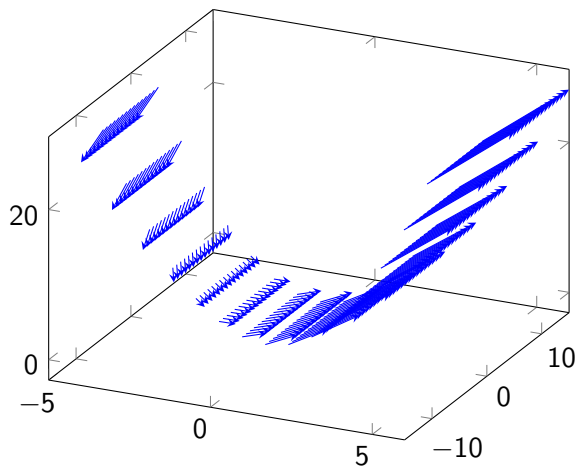
# Plots



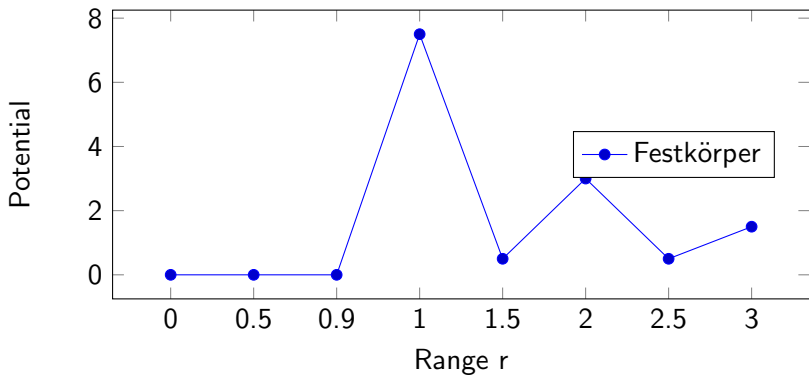
# Plots



# Plots



# Festkörper



# Simulation

## Einsperren

- Partikel in einen Block einsperren und freilassen

# Simulation

## Einsperren

- Partikel in einen Block einsperren und freilassen

## Objekte

- unpassierbare Objekte in den Raum platzieren
- Semipermeable Objekte

# Observablen

## ETWAS

- Ein Partikel verfolgen
- Simulation als Gif darstellen

Vielen Dank  
für  
Eure Aufmerksamkeit.