

Molecular Dynamics Simulation

Marco Stumper und Alexander Walter

Universität Hamburg

January 28, 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 $\rho = \frac{N}{L^3}$

Erklärung

Grundlegendes

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

Initialisierung

- Die Partikel werden an zufälligen Orten platziert (Optional in einem Kasten)
- Die Box hat periodische Randbedingungen

Erklärung

Grundlegendes

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

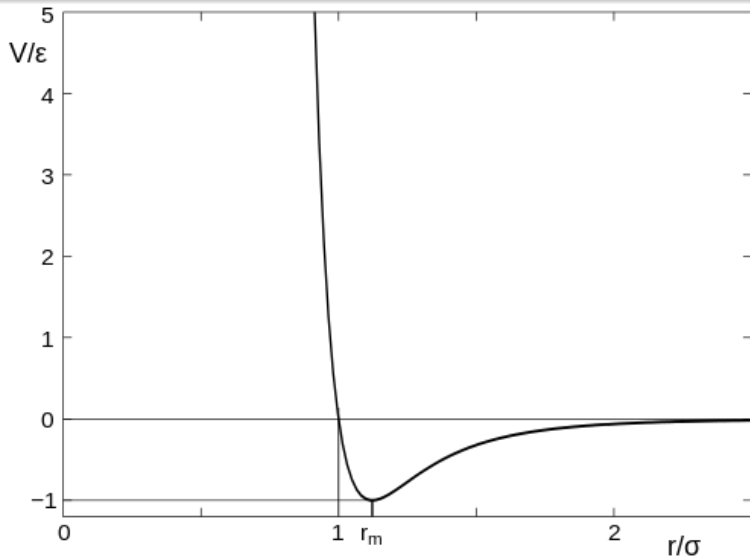
Initialisierung

- Die Partikel werden an zufälligen Orten platziert (Optional in einem Kasten)
- Die Box hat periodische Randbedingungen

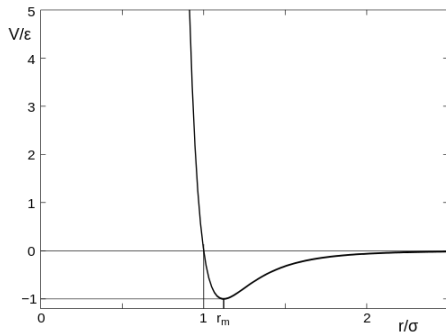
Simulation

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

Lennard-Jones-Potential

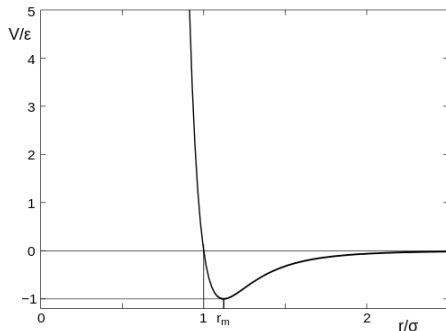


Lennard-Jones-Potential



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

Lennard-Jones-Potential



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

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

Observablen

Berechnung

- Mit den 2 Arrays werden die neuen Geschwindigkeiten berechnet
- Wir verwenden dafür den Verlet-Algorithmus

Observablen

Berechnung

- Mit den 2 Arrays werden die neuen Geschwindigkeiten berechnet
- Wir verwenden dafür den Verlet-Algorithmus

Verlet

-
-

XML Code

```
<RECTANGLE>  
  <TITLE>Quader 1</TITLE>  
  <LOCATION>  
    <MIDDLEPOINT>  
      <X>4</X>  
      <Y>4</Y>  
      <Z>4</Z>  
    </MIDDLEPOINT>  
    <LENGTHS>  
      <X>100</X>  
      <Y>100</Y>  
      <Z>100</Z>  
    </LENGTHS>
```

XML Code

```
</LOCATION>  
<POTENTIAL>  
  <V>3</V>  
</POTENTIAL>  
  
<PARTICLES>  
  <COUNT>1000</COUNT>  
  <MASS>20</MASS>
```

Code Aufbau

Eingabe



Code Aufbau

Eingabe

-
-

Ausgabe

-
-

Erster Zustand

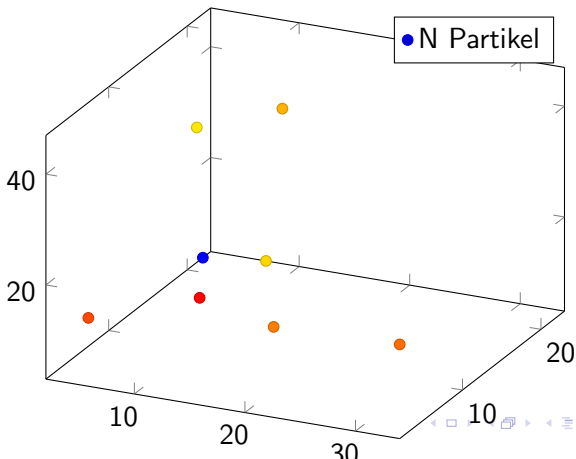
Initial

- N Partikeln mit Geschwindigkeit v
- Zufällig auf den Raumkoordinaten x,y,z verteilt

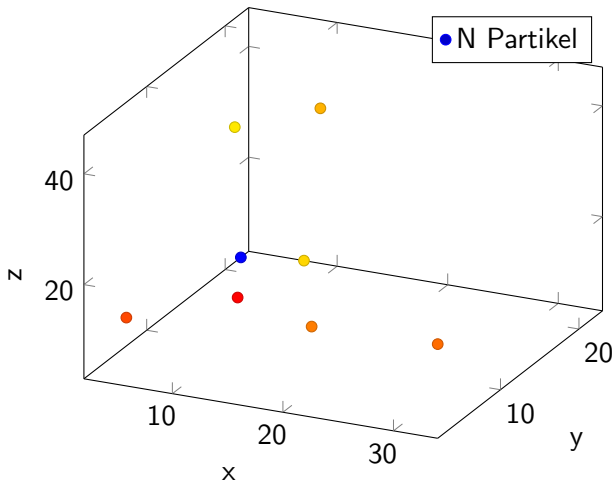
Erster Zustand

Initial

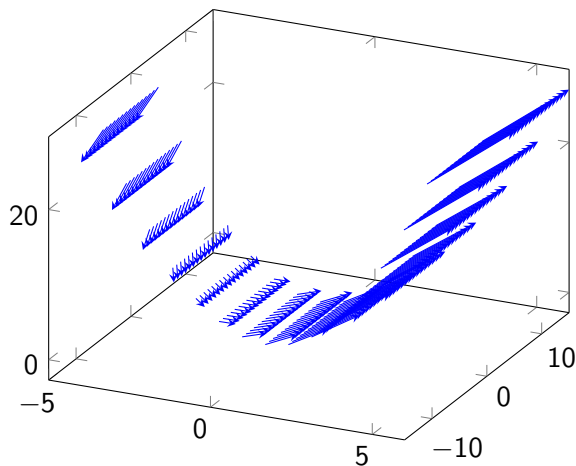
- N Partikeln mit Geschwindigkeit v
- Zufällig auf den Raumkoordinaten x, y, z verteilt



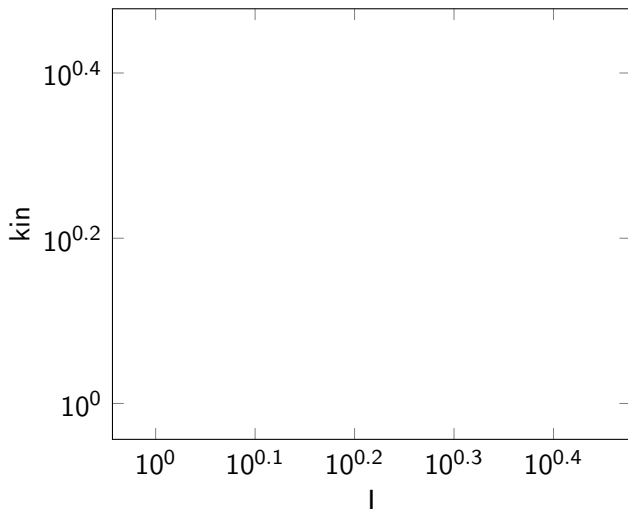
Festkörper



Plots



Convergence Plot



Welt

Objekte

- unpassierbare Objekte in den Raum platzieren
- permeable/semipermeable Objekte

Welt

Objekte

- unpassierbare Objekte in den Raum platzieren
- permeable/semipermeable Objekte

Observablen

- unterschiedliche Startgeschwindigkeiten
- v binomial auf die Teilchen verteilen
- abkühlen des Systems über Zeit

Vielen Dank
für
Eure Aufmerksamkeit.