

# Molecular Dynamics Simulation

Marco Stumper und Alexander Walter

Universität Hamburg

January 30, 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  $\rho = \frac{N}{L^3}$

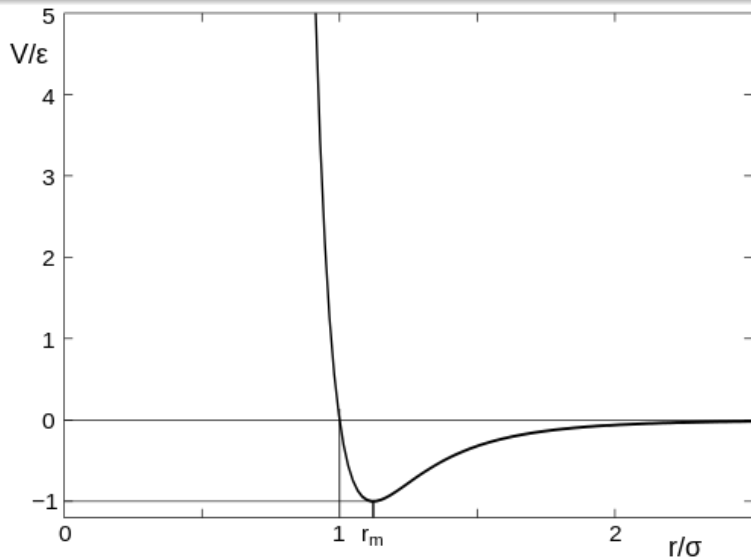
## Initialisierung

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

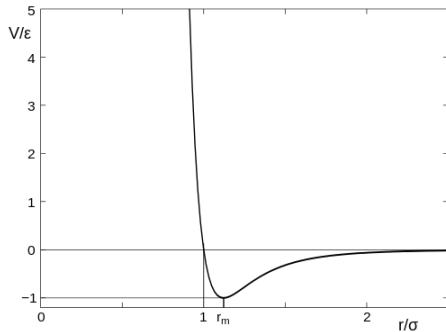
## Simulation

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

# Lennard-Jones-Potential

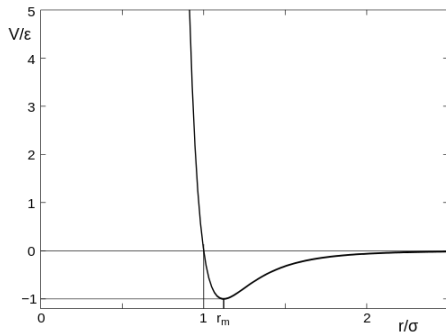


# Lennard-Jones-Potential



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

# Lennard-Jones-Potential



- $V(\infty) = 0$ ,  $V(0) = \infty$
- $\epsilon$  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>
  <VELOCITY TYPE="constant">2000</VELOCITY>
</PARTICLES>

</RECTANGLE>
</OBJECTS>
```

## XML Code

</WORLD>

# Erster Zustand

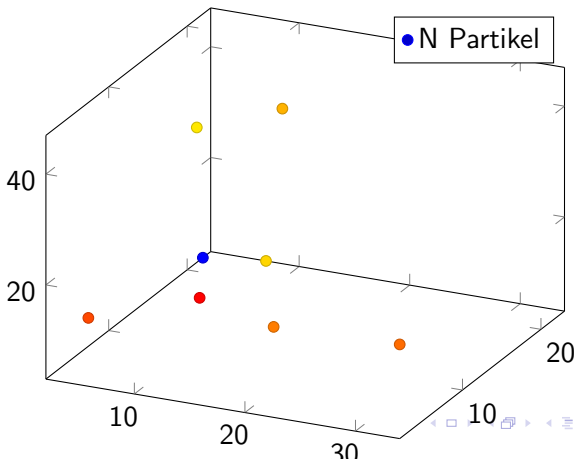
## Initial

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

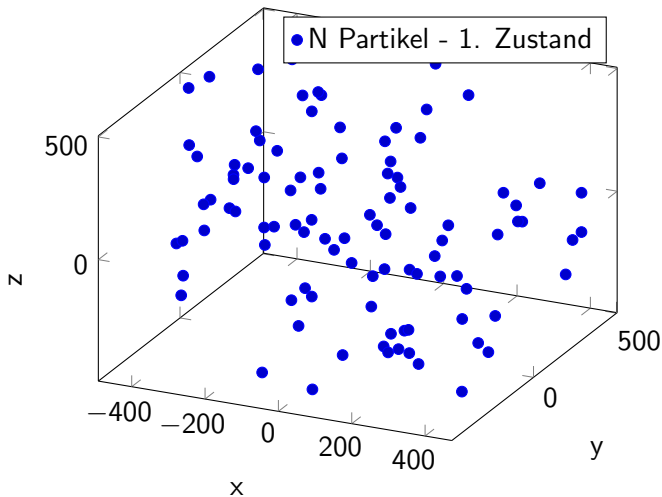
# Erster Zustand

## Initial

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

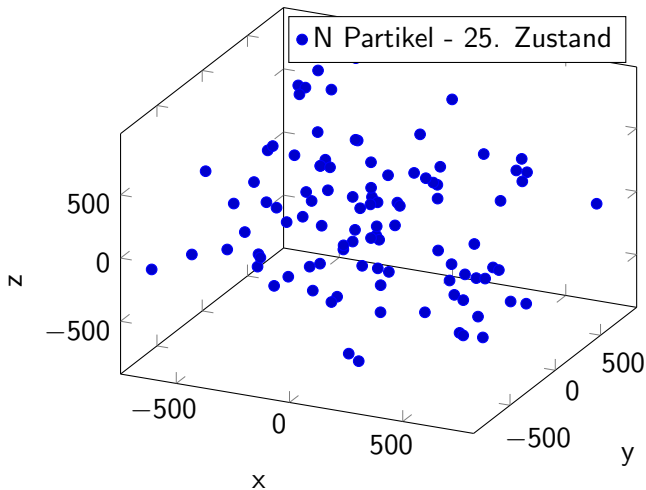


# Festkörper

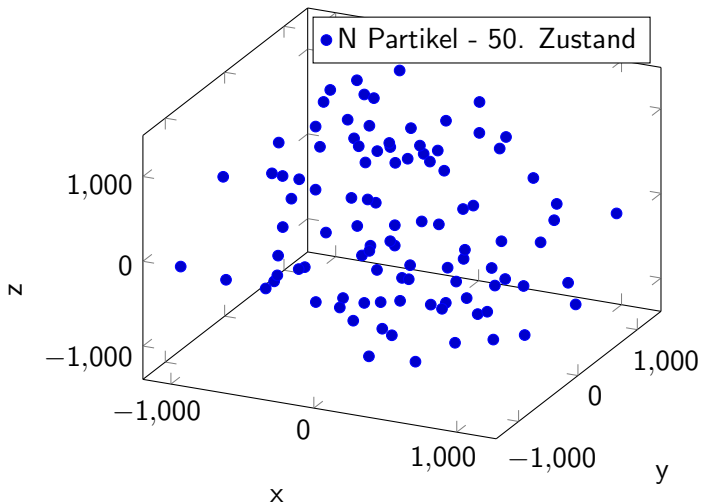




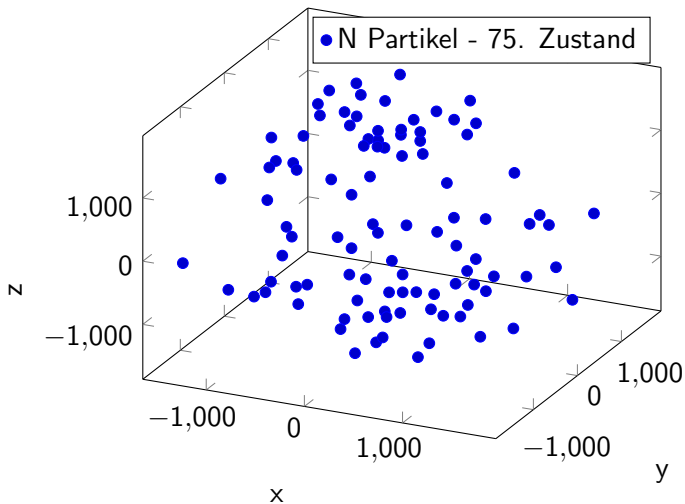
# Festkörper



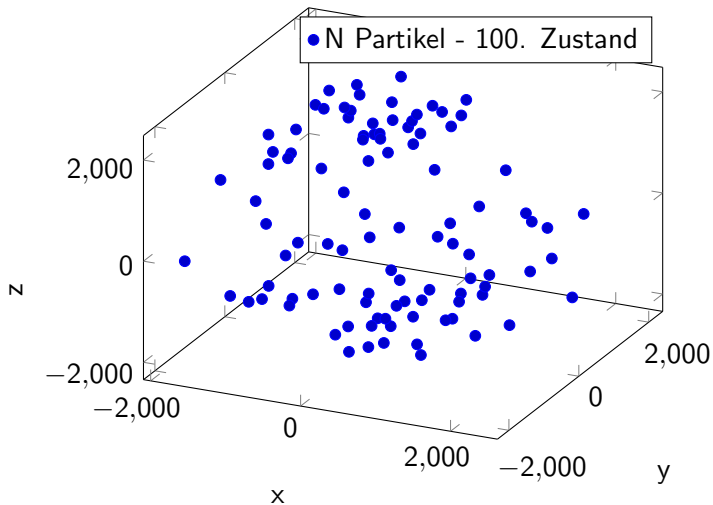
# Festkörper



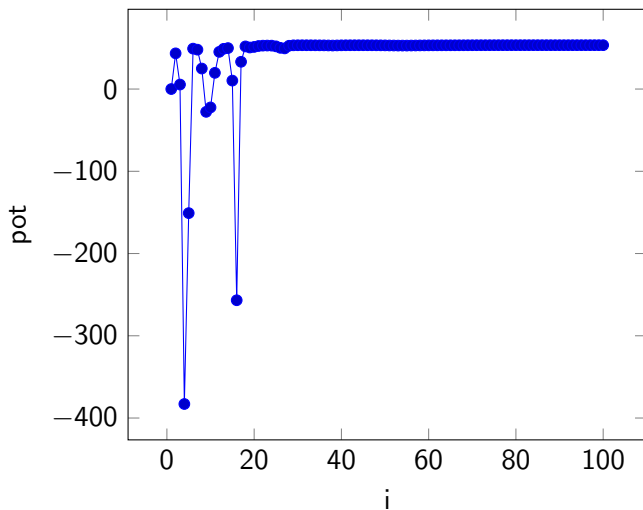
# Festkörper

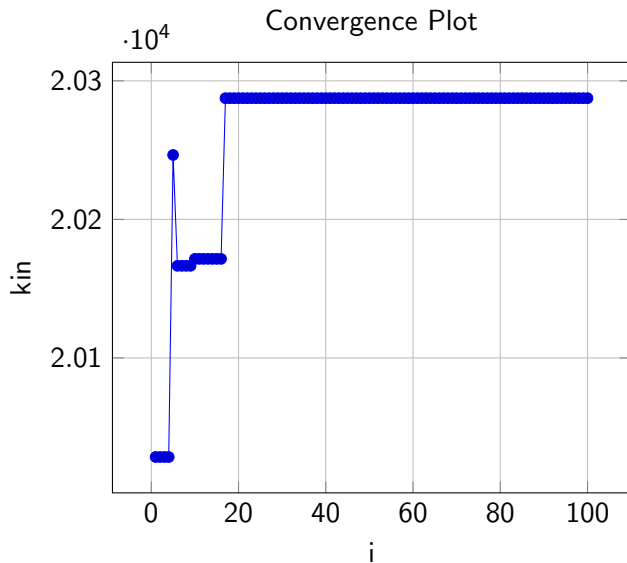


# Festkörper



## 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
- Dichtverteilung bestimmen



Vielen Dank  
für  
Eure Aufmerksamkeit.