

2.1 Reibungskraft

Zeitschritt aus <https://doi.org/10.1063/1.2997345>:

$$\Delta t = 0.17 \frac{\zeta R_e^2}{N k_B T} \quad (13)$$

$$\implies \zeta = \frac{N k_B T \Delta t}{0.17 R_e^2} . \quad (14)$$

Mit $N = 32$ gibt das $\zeta = 188.24 \frac{k_B T \Delta t}{R_e^2}$. Alternativ, mit MSD $g_3(t)$:

$$D = \frac{g_3(t)}{6t} = \frac{g_3(n\Delta t)}{6n\Delta t} = \frac{k_B T}{\zeta N} . \quad (15)$$

Aus gemessenem $g_3(t)$ ergibt sich für mein System $\zeta = 362.3 \frac{k_B T \Delta t}{R_e^2}$. Dementsprechend erhalte ich unterschiedliche Werte für das Biegemodul K .