

BA To do

Justus Multhaup

9. Mai 2023

1 Kollektive Diffusion, Onsager Koeffizient

- Für lange Simulationen ist $MSD \gg l_x$ durch harte Wände effektiv zwei Freiheitsgrade weniger. Also ist dann $D = MSD/4t$ statt $D = MSD/6t$
 - Nur y und z MSD verwenden
- Onsager Koeffizienten ausrechnen
 - plote Phasenverschiebung und Amplitude als Funktion von x
 - Zeitskala Rousezeit $\tau_R/3\pi^2$

2 Konversionsalgorithmus

- Analyse: wie gut stimmt es am Rand überein (Lossfunktion), wie weit reicht es in Bulk hinein?
- Wie analysiert man letzteres?
- **Ketten zwischendrin nochmal bewegen? Weitere MC moves, wie mit externem Feld**
- **Modifiziere Interaktionsteil der ω Felder mit Target-Dichten**
- entweder alles gleich lassen und ΔL ändern oder bei gleichem \sqrt{N} und gleichem ΔL Diskretisierung N ändern - je weniger pro Zelle, je schlechter das Optimum
- $T_{min} = \left(\frac{1}{\rho_0 \Delta L^3}\right)^2$ ausprobieren
- **Bei Flips bei $t = 0$: Vielleicht Berechnung der Akzeptanzrate anpassen? Bisher wird diese aus Zahl der akzeptierten Flips von 1000 berechnet**
- **Wie genau Fehler bei Optimierung normieren? Bisher: $\sigma_0^2 = 0.0422$**
 - schauen in SCMF paper, Dichtefluktuationen gegeben durch κN Term
 - erhalte verschiedene Werte für verschiedene Nbar
- Optimum mit und ohne SA fast gleich, Unterschied wird mit wachsendem \sqrt{N} geringer
- Anstatt \sqrt{N} zu variieren Monomere pro Zelle variieren
- Noch einen Lauf mit $\sqrt{N} = 10$ und große Zellen senkrecht zu Schachbrett (quaderförmiges System, 32 Teilchen pro Zelle) gleiche Anzahl an Teilchen in „großen Zellen“ wie in kleinen Zellen bei großem Nbar

- Kollektiven Strukturfaktor (Suszeptibilität $\chi = \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} \propto 1/\sqrt{N}k_B T$, Antwort der Dichte auf chemisches Potential mal Einzelkettenstrukturfaktor) der Zusammensetzung ausrechnen, Debye-funktion
- Lamellare Randstruktur wichtig, wie gut passt das zu natürlicher Lamellenbreite?
- Bild: paar mal laufen lassen, gemittelt Dichteprofil
 - Die Variation der Dichte nahe an Konversionszone messen, wie weit? Mit welcher Amplitude?
- Wegen Zeitabhängigkeit: vlt nochmal wie bei externen Feldern
- Inwiefern ist Ausrichtung der Ketten beeinflusst? Insbesondere mit MC Schritt dazwischen

3 Externes Feld, Lamellenbiegung

- Biegespannung
 - Box mit einer Lamelle (oder wenigen), Box strecken in Richtung senkrecht zu Lamellen, Fläche zurückfahren - Lamellen strecken
 - Stress muss isotrop sein: gebundenen Einzelkettenstress ausrechnen: wenn $B_x^2 = B_y^2 = B_z^2$, habe equilibrium spacing wenn alle gleich
 - spacing in fertigen Simulationen erstmal so lassen
 - bending stiffness im WSL? auch im Zhen Gang Wang paper
 - Gompheh, Zoschke, europhysics letters
 - bei Grenzflächenspannung Faktor 3 wegen 3 Grenzflächen?
 - Rechnungen von Müller aus SCFT: Sinusförmige Biegung, einfach sinus integrieren mit angegebener Amplitude