

FYS4460  
Advanced Molecular Dynamics

by

Ole Tobias B. Norli

*Prosjekt 1*

*February 2013*

# 1 Abstract

Vi skal modellere Argonatomer som beveger seg rundt hverandre og påvirker hverandre med et potensial. Nå skal vi også låse noen av atomene, lage porer, for å modellere et porøst medie.

## 2 Initialisere systemet

Vi ønsker her å studere flytende argon. Dette betyr at vi bruker  $b = 5.72\text{\AA}$ . Jeg vil referere til rapport 1 på samme github profil som du fant denne rapporten for mer detaljer om hvordan vi initialiserer systemet. Jeg valgte å ikke parallelisere koden.

## 3 Sylinderporer

Vi ønsker å legge til porer. Dette er områder som vi skiller ut fra resten av systemet. I praksis gjør vi dette med en bool verdi, slik at vi enkelt kan sette partiklene inne i poren til å stå stille, mens resten av partiklene beveger seg, eller motsatt. Først prøver vi med en sylindrisk pore i midten med radius på 2 nm. Vi lar sylindren gå langs z aksen.

## 4 Kuleporer

La oss nå innføre kuleformede porer. Vi putter 20 slike inn i systemet vårt i tilfeldige posisjoner. Porene vår skal ikke overlappe hverandre. La oss bruke varierende radius for hver pore, men størrelsesorden 1 nm. Porøsiteten er definert som

$$P = \frac{\sum_{\text{alleporer}} PorensVolum}{TotaltVolum}$$

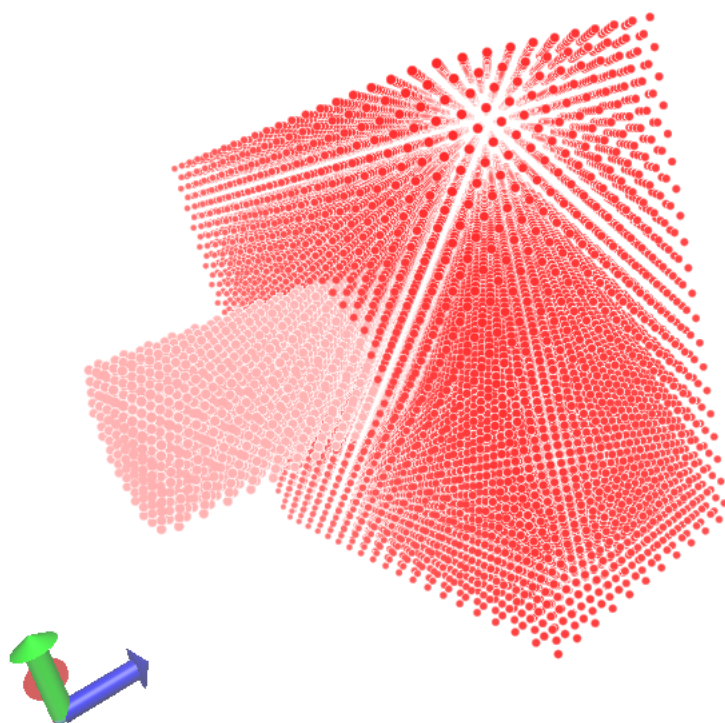
Dette gir oss en porøsitet på 0.11. Ca 10 prosent av volumet vårt er disse kuleporene.

## 5 Halvert tetthet

Vi ønsker nå å halvere tettheten. Dette gjør vi enkelt ved å sette  $b' = 2^{1/3}b$ , slik at volumet vårt dobles men antall partikler holdes konstant.

Vi bruker nå 20 sylinderporer med radius mellom 1 og 1.5 nm. Vi termaliserer i 500 tidssteg med Berendsen termostat og  $T = 1.5T_0$ .  $N = 10$  og  $dt = 0.05$ . Vi lar atomene bevege seg inni porene, og stå stille utenfor.

Vi får en porøsitet på 0.25.

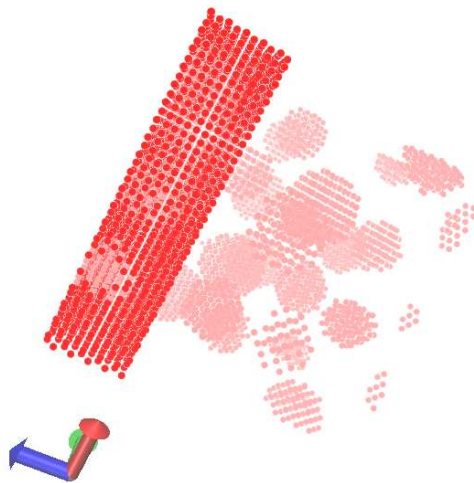


Figur 1: Visualisering av poren vår. Atomene inni poren beveger seg.

## 6 Pressure cells

Vi ønsker å måle trykket med romlige koordinater som variable. Dette gjør vi ved å dele inn volumet vårt i trykceller. Vi deler det inn i 1000 celler. Siden vi måler trykket mellom 2 atomer kan vi enkelt summere trykket i hver enkelt celle basert på hvilke atomer som befinner seg inni denne cellen til enhver tid.

Vi kjører programmet med en sylinderformet pore og måler trykket i trykcellene. For at atomene utenfor poren skal stå stille må summen av krefter på disse atomene fysisk sett være 0, vi setter derfor kreftene til 0 på disse.



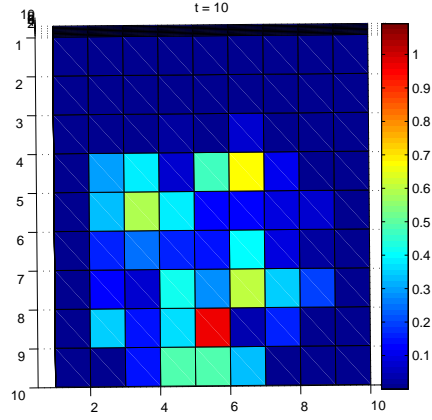
Figur 2: Visualisering av kuleporene våre. Vi har fjernet atomene som står stille på størstedelen av området. De røde prikkene på plotten symboliserer atomene som står stille og vi ser kulene ligger inni disse områdene. De røde atomene omringer egentlig alle porene på bildet.

Vår output vil være en 1000 trykceller, men siden det er vanskelig å visualisere dette i 3 dimensjoner tar vi en slice langs Z akse, altså akse sylindren vår vil skjere igjennom, slik at vi vil få poren vår representert som en sirkel. La oss se på en enkel kjøring med 100 tidssteg, og se ved  $t = 10, 20, 30, 40$  bare for å konstatere at trykket endrer seg i romlige variable over tid.

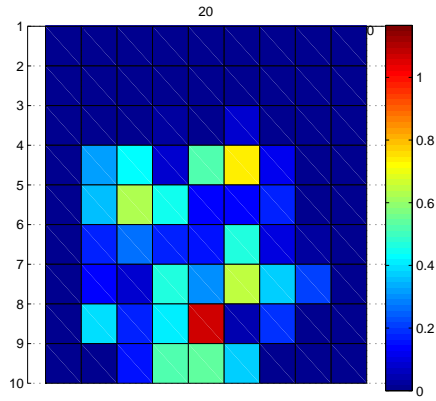
Vi ser trykket endrer seg over tid og er sentrert inne i poren. La oss også ta med et plot over temperaturen for å forsikre oss om at temperaturmålingene våre ikke ødelegges av introduksjon av porer. Vi kjører samme system med 300 tidssteg, og 100 av dem med Berendsen termostat. Vi ser temperaturen oppfører seg som før.

I programimplementasjonen vår oppdaterer vi ikke hastighetene til atomene som står stille ved Verlet algoritmen, men jeg lot termostatene våre funke på de slik at temperaturen utenfor porene vil i programmet holde samme temperatur som innenfor poren.

Dette blir litt misvisende fysisk siden temperaturen er gitt som funksjon av kinetisk energi, altså hastighet, men atomene skal ikke bevege seg. Dette betyr hastigheten bør være 0, men likevel lar jeg de påvirkes av termostat, noe som gjør at hastigheten ikke er 0. Dette bør likevel ikke gi oss noen problemer i de målingene vi gjør, men verdt å vite.



Figur 3:  $t = 10$ .



Figur 4:  $t = 20$ .

## 7 $\langle r^2(t) \rangle$ for halv tetthet nanoporøs Argon væske

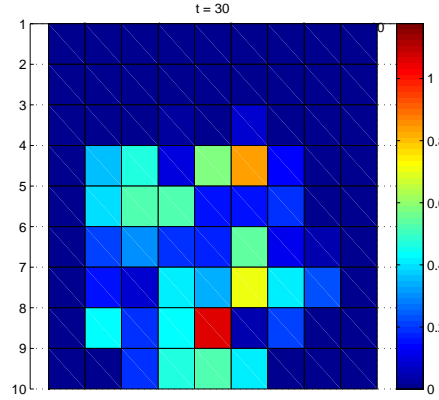
La oss kjøre  $N = 10$ , 2000 tidssteg, hvorav 1000 med Berendsen termostat og en pore på 2-3 nm. Vi måler  $\langle r^2(t) \rangle$  og diffusion konstanten. Vi måler bare for atomene som beveger seg. Vi ser på målingene etter  $t=1000$ . Diffusion konstanten flater ut ser vi rundt  $5.5e-4$ .

## 8 Introduserer Flow

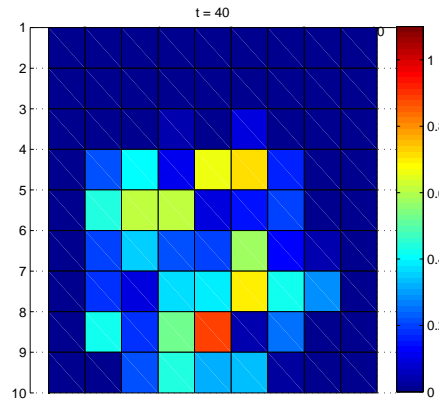
La oss introdusere flow i systemet vårt. Flow i et gravitasjonsfelt er gitt ved Darcys lov.

$$U = \frac{k}{\mu}(\Delta P - \rho g) \quad (1)$$

Vi ønsker å introdusere en konstant flow.



Figur 5:  $t = 30$ .



Figur 6:  $t = 40$ .

$$\mathbf{F} = F\mathbf{i} \quad (2)$$

Denne flowen minner mye om flowen i et gravitasjonsfelt. Vi lar flowen virke i samme retning som sylinderporene våre peker.

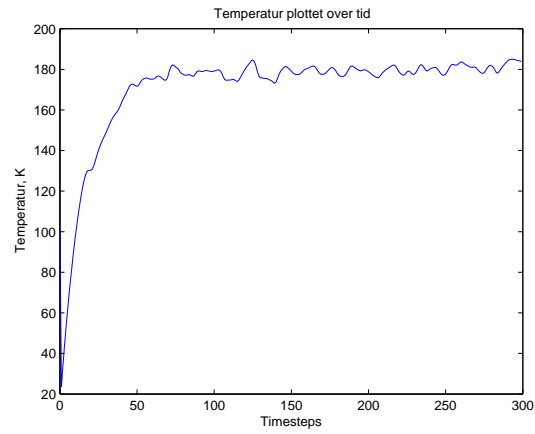
Vi vet

$$\rho = \frac{M}{V}$$

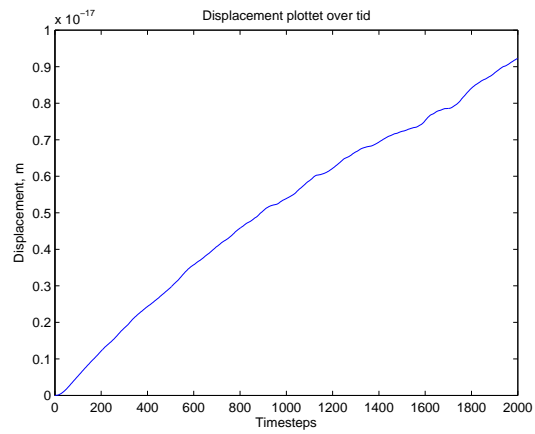
der  $M$  er total masse og  $V$  er totalt volum. Dette kan omskrives hvis vi antar alle partiklene har lik masse.

$$\rho = \frac{Nm}{V} = \frac{N}{V}m$$

der  $N$  er antall partikler og  $m$  er masse per partikkel. Vi definerer  $n = \frac{N}{V}$ .



Figur 7: Temperatur som funksjon av tid.



Figur 8:  $\langle r^2(t) \rangle$

$$\rho = nm$$

$$m = \frac{\rho}{n}$$

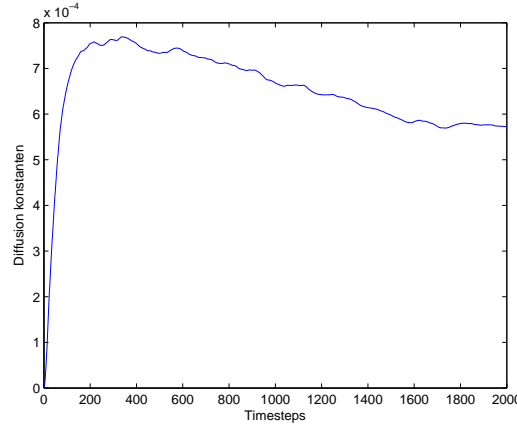
Vi bruker så Newtons lov

$$F = ma$$

Og setter inn gravitasjon, og m, og kraften er den flowen vi nå introduserer

$$F = \frac{\rho}{n}g$$

$$\rho g = nF$$



Figur 9: Diffusion konstanten

Vi kan altså erstatte  $\rho g$  med  $nF$  i Darcys lov og får ut:

$$U = \frac{k}{\mu}(\Delta P - nF) \quad (3)$$

## 9 Måling av flow profil, $u(r)$

La oss introdusere denne kraften i programmet vårt, gitt ved

$$\mathbf{F} = 0.1n\frac{\epsilon}{\sigma}\mathbf{i} \quad (4)$$

Siden vi tidligere bruker kraft med dimensjonen  $\frac{\epsilon}{\sigma}$  blir kraften vi nå implementerer enkelt og greit bare

$$\mathbf{F} = 0.1\mathbf{i} \quad (5)$$

Men vi legger kraften til å virke i samme retning som sylindrene våre. I vårt tilfelle er det langs  $z$  akse.

Vi ønsker å måle hastighetsfordelingen til partiklene og kalle dette flow profile,  $u(r)$ . Vi tar et tversnitt i cylindren vår langs  $z$  akse, for enkelhetsskyld velger vi ved  $r = L$  eller  $r = 0$ . Dette tversnittet registrerer vi allerede partikler som passerer, men nå noterer vi også posisjonen i  $x$ - $y$  planet de har når de passerer. Vi noterer partikler som passerer igjennom  $r=L$  og noterer dette til en fil, partikler som passerer  $r=0$  noteres til en annen fil.

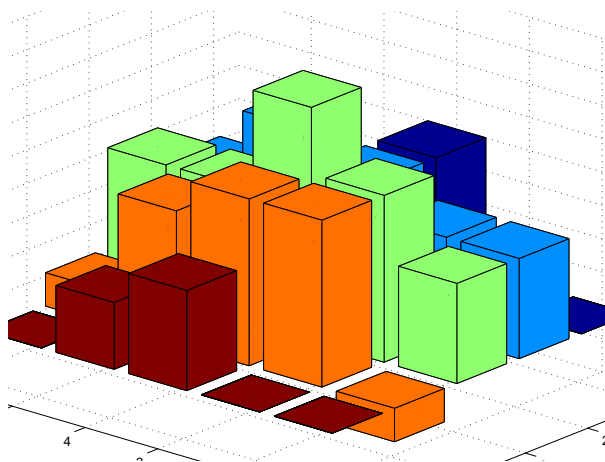
Vi vet partiklene oscillerer selv om det er flow, altså er det rimelig at de går frem og tilbake igjennom dette tversnittet flere ganger. Denne effekten må vi fjerne. Derfor deler vi inn tversnittet vårt i et histogram, vi lager to histogrammer for partikler igjennom  $r=L$



og  $r=0$ , altså frem eller tilbake igjennom tversnittet.

Vi antar en partikkel som oscillerer på tversnittet vårt ikke vil endre  $x,y$  koordinater så mye før den dyttes igjennom. Tar vi det ene histogrammet minus det andre histogrammet burde vi derfor fjerne disse. Det er derimot essensielt at størrelsen på søylene i histogrammet er større enn endringen i  $x,y$  koordinater vi har før partiklene dyttes igjennom.

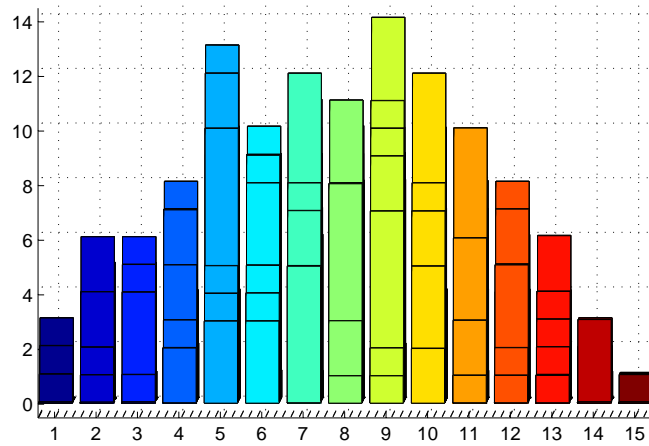
Vi kjører en gang 400 tidssteg,  $N = 8$ , og 100 ganger  $F$  for å se noe resultater. Berendsen og flow kraften skrur vi av etter 200 tidssteg.



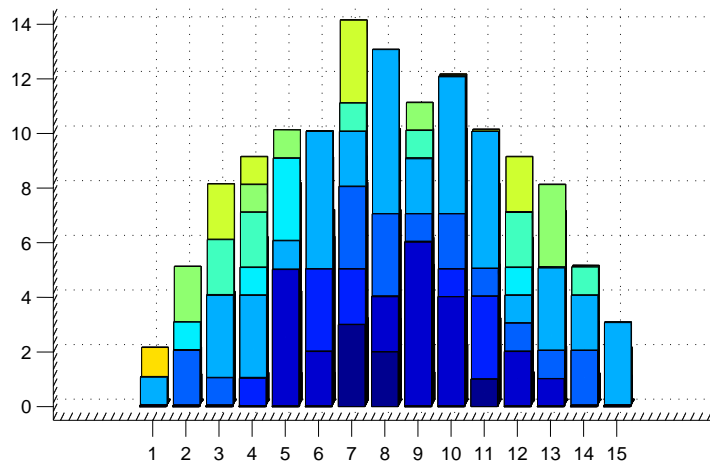
Figur 10: Antall passeringer gjennom et tversnitt langs sylinderporen vår.

Vi ser antallet passeringer er størst i midten av poren vår. Dette betyr hastigheten er størst. Antall passeringer er proporsjonalt med hastigheten. Plotten er altså en hastighetsfordeling,  $u(r)$ . La oss nå prøve en større kjøring med flere tidssteg.

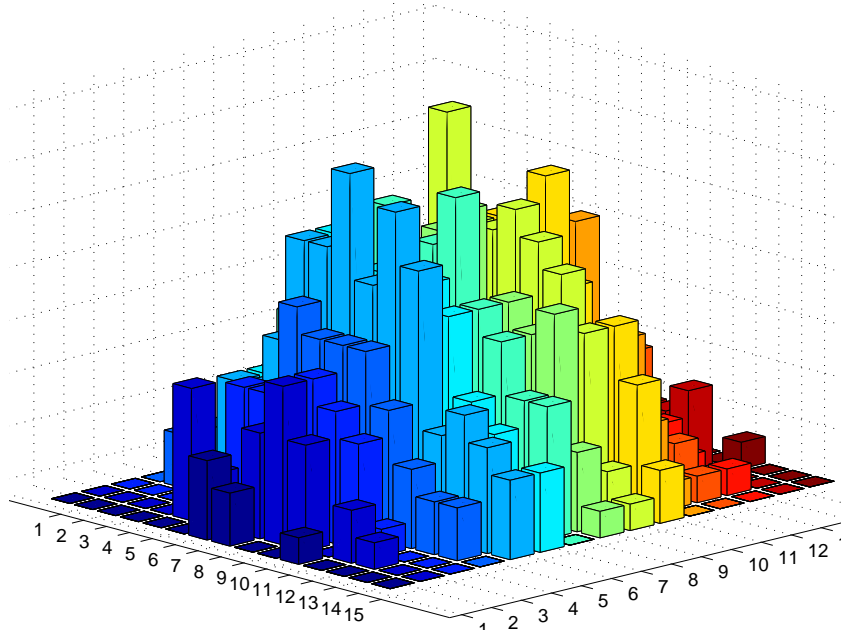
Vi tar  $F' = 25F$ ,  $N = 10$  og 2000 tidssteg, hvorav 1000 med termostat og flow. Verdt å nevne at når vi har termostaten og flow på samtidig tvinger vi energien i systemet til å være bevart, selv om det er en flow. Det som skjer er at hastigheten vil peke mer og mer langs  $Z$  retning relativt til  $X$  og  $Y$ . Vi ser på vår 3 dimensjonale hastighetsfordeling fra flere vinkler, siden den er 3D.



Figur 11: Antall passeringer gjennom et tversnitt langs sylinderporen vår.



Figur 12: Antall passeringer gjennom et tversnitt langs sylinderporen vår.

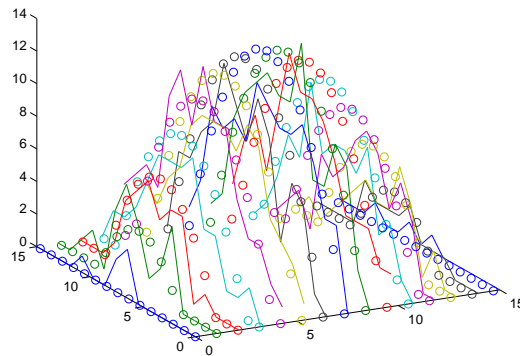


Figur 13: Antall passeringer gjennom et tversnitt langs sylinderporen vår.

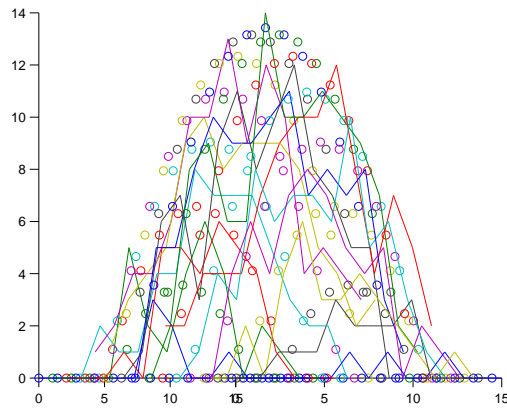
Nå vil vi tilnærme denne fordelingen med en formel for flow profile. Formelen vi tilnærmer med er

$$U = \frac{1}{\mu} \frac{F}{4\pi a^2 L} (a^2 - r^2) \quad (6)$$

Der  $\mu$  er den vi vil finne. Måten vi gjør det på er å prøve forskjellige  $\mu$  helt til den passer bra. Vi fant en ok fit for  $\mu = 7 \times 10^{-4}$ .



Figur 14: Fit for U og våre resultater.



Figur 15: Fit for U og våre resultater.

## 10 Permeabilitet

Vi finner permeabiliteten gitt ved

$$K = \frac{a^2 \phi}{8} \quad (7)$$

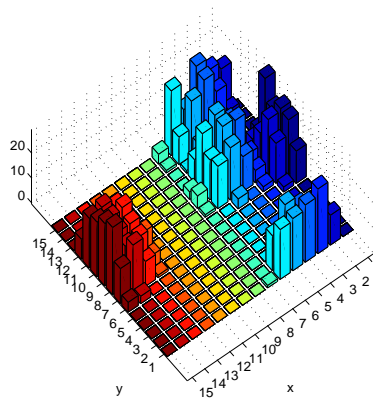
der K er permeabiliteten, a er radius i sylinderporen vår og  $\phi$  er porøsiteten. Porøsiteten er gitt ved volum av sylinder delt på totalt volum.

Vi får en permeabilitet på  $K = 19.9$  (benedning?), med  $\phi = 0.31$ , en sylinder med  $a = 22.64\text{nm}$ .

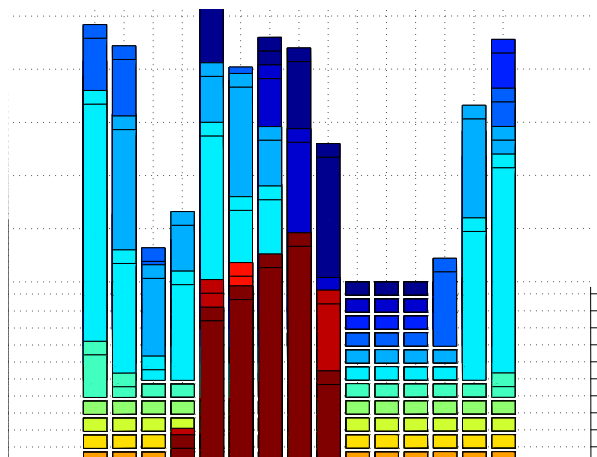
## 11 Stor kjøring med masse porer

Vi prøver til slutt en stor kjøring med 3 porer,  $N = 20$ ,  $\phi = 0.30$ , 500 tidssteg med Berendsen og  $F' = 100F$  og 500 tidssteg til med målinger.

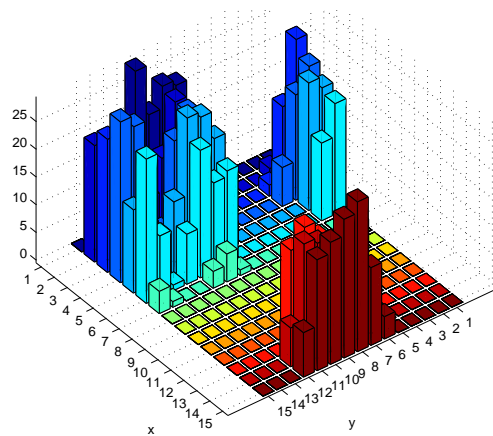
Vi ser flow profilen er bevart. Det er 3 porer.



Figur 16: Flow igjennom flere porer. Den ene poren nederst til venstre krysser y akse og fortsetter på andre siden. Den andre poren nederst til høyre krysser x akse og fortsetter på andre siden. Den tredje poren er imellom de to andre.



Figur 17: Flow igjennom flere porer. Den ene poren nederst til venstre krysser y akse og fortsetter på andre siden. Den andre poren nederst til høyre krysser x akse og fortsetter på andre siden. Den tredje poren er imellom de to andre.



Figur 18: Flow igjennom flere porer. Den ene poren nederst til venstre krysser y akse og fortsetter på andre siden. Den andre poren nederst til høyre krysser x akse og fortsetter på andre siden. Den tredje poren er imellom de to andre.