

Ausgabe: 28.04.2022
Abgabe: 12.05.2022 20 Uhr

Prof. H. Jelger Risselada

Aufgabe 0: Verständnisfragen

0 Punkte

- 1) Worauf müssen Sie bei der Initialisierung einer MD-Simulation achten? Warum ist dies notwendig?
Tipp: Was würde passieren, wenn zwei Teilchen exakt den gleichen Ort haben?
- 2) Was beschreibt die Paarkorrelationsfunktion? Welche Eigenschaften hat diese und was können Sie anhand dieser über das zugehörige System aussagen?
- 3) In welchem Ensemble wird bei der MD-Simulation gearbeitet? Was sind die natürlichen Größen? Was ändert ein Thermostat an diesen Tatsachen?

Aufgabe 1: 2D Lennard-Jones-Fluid

40 Punkte

Molekulardynamik-Simulationen sind ein essenzielles Tool der numerischen Physik, um das Verhalten von größeren Mengen an Atomen oder Molekülen zu beschreiben, wenn das Potential ihrer Wechselwirkung bekannt ist. In dieser Aufgabe soll eine solche Molekulardynamik-Simulation nun beispielhaft für ein einfaches Bad ungeladener Teilchen in zwei Dimensionen durchgeführt werden. Die Wechselwirkung solcher Teilchen kann dabei durch das Lennard-Jones Potential beschrieben werden.

Schreiben Sie eine Molekulardynamik-Simulation für N identische Teilchen der Masse $m = 1$ mit paarweiser Lennard-Jones-Wechselwirkung

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (1)$$

Setzen sie $\epsilon = \sigma = 1$, d.h. Längen werden in Einheiten von σ und Energien bzw. $k_B T$ in Einheiten von ε gemessen. Benutzen Sie periodische Randbedingungen in einem zweidimensionalen System der Größe $A = L \times L$. Verwenden Sie einen Cutoff $r_c = L/2$ bei der Kraftberechnung. Verwenden Sie den Verlet-Algorithmus mit Zeitschritt $h = 0.01$ (oder kleiner bei hohen Temperaturen) zur Integration.

a) Initialisierung:

Setzen Sie $N = 16$ Teilchen zu Beginn auf Plätze $\mathbf{r}(0) = \frac{1}{8}(1+2n, 1+2m)L$ mit $n, m = 0, \dots, 3$ in der Box $[0, L] \times [0, L]$. Wählen Sie die Anfangsgeschwindigkeiten so, dass $\sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(0) = 0$, d.h. dass die Schwerpunktgeschwindigkeit zu Beginn gleich 0 ist. Schreiben Sie das Programm so, dass Sie die Geschwindigkeiten umskalieren können, um bei einer gegebenen „Anfangstemperatur“ $T(t=0)$ starten zu können.

Hinweis: Zur Generation der Zufallszahlen können Sie fertige Generatoren verwenden, in C++ beispielsweise mit `<random>`:

```
#include<random>
mt19937 rnd;
uniform_real_distribution<> dist(0, 1);
random_number = dist(rnd);
```

b) Messung/Äquilibration:

Starten Sie bei $T(0) = 1$. Berechnen Sie die Schwerpunktsgeschwindigkeit $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(t)$ als Funktion der Zeit. Berechnen Sie die Temperatur $T(t)$ als Funktion der Zeit. Berechnen Sie die potentielle Energie $E_{\text{pot}}(t) = \sum_{i < j-1}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ und die kinetische Energie $E_{\text{kin}}(t) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \mathbf{v}_i^2$ als Funktion der Zeit. Nach wie vielen Zeitschritten äquilibriert Ihr System?

c) Messung:

Nachdem Ihr System äquilibriert ist, messen Sie die Temperatur T und die Paarkorrelationsfunktion $g(r)$. Dazu führen Sie nach der Äquilibrationphase eine Mittelung über 10^4 bis 10^6 Zeitschritte durch (abhängig davon, wie lange Sie warten möchten).

Messen Sie die Größen für $N = 16$, $L = 8\sigma$ und bei drei verschiedenen „Anfangstemperaturen“ $T(0) = 1$, $T(0) = 0.01$ und $T(0) = 100$. Welche Phasen erkennen Sie?

d) Thermostat: **(Bonus: 5 Punkte)**

Bauen Sie nun einen isokinetischen Thermostat in Ihre Simulation ein, welcher dafür sorgt, dass die Temperatur konstant bleibt. Was passiert nun bei $T = 0.01$? Schauen Sie sich die potentielle, kinetische und Gesamtenergie während der Äquilibration an und messen Sie $g(r)$ an dem äquilibrierten System. Es kann auch interessant sein, sich Snapshots, also Bilder der Konfiguration des Systems, anzuschauen.