6. Übungsblatt zu Computersimulationen
SS 2006

Schreiben Sie eine **Molekulardynamik**-Simulation. Es soll der so genannte **velocity-Verlet algorithm** verwendet werden, der äquivalent zu dem in der Vorlesung besprochenen Algorithmus ist:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t+\tau) &= \mathbf{r}(t) + \tau\,\mathbf{v}(t) + \tau^2\,\mathbf{f}(t)/2,\\ \mathbf{v}(t+\tau) &= \mathbf{v}(t) + \tau\,\{\mathbf{f}(t+\tau) + \mathbf{f}(t)\}/2.\end{aligned}$$

Die physikalische Situation ist folgende:

- N Teilchen sind in einem 2-dimensionalen Kasten eingeschlossen.
  Einen Kasten kann man simulieren, indem man z.B. am Rand ein stark ansteigendes Potential addiert:

  $$\text{für } x \geq x_{\text{max}}: \qquad F_{x,\text{Kasten}} = \exp\{\alpha\,(x - x_{\text{max}})\} - 1 \qquad .$$

  Analoges gilt für x_{min} und die y-Achse.

- Zwischen den Teilchen wirkt eine durch das Lenard-Jones Potential verursachte Kraft:

  $$U = 4\epsilon \sum_{i \neq j} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6} \right] \qquad ,$$

  mit $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$.

- Als Anfangsbedingung kann man z.B. die Geschwindigkeiten der Teilchen per Zufall festlegen. Bei den Anfangspositionen muss man vorsichtig sein, um nicht zu viel potentielle Energie ins System zu initieren. Es empfiehlt sich die Teilchen in einem Gitter zu plazieren, das in etwa die Gittergröße ihrer Gleichgewichtsabstände ($\sim \sigma$) besitzt.

Die Simulation

Es soll eine Zeit t_{burnin} ablaufen, in der das System unabhängig von den Anfangsbedingungen wird. Dann soll mit der Messung der Geschwindigkeitsverteilung $f(|\mathbf{v}|)$ begonnen werden. Dazu werden pro Messung die Beträge $|\mathbf{v}|$ der Geschwindigkeiten der einzelnen Teilchen berechnet. Nach insgesammt N_{mess} (~ 300) Messungen werden die Geschwindigkeitsbeträge in einem Histogramm dargestellt (`hist`-Befehl in MATLAB, Normierung berücksichtigen) und geplottet (`bin`-Befehl in MATLAB). Zwischen den einzelnen Messungen soll eine Zeit t_{skip} (~ 200) verstreichen.

In das Histogramm kann man die 2-dimensionale Maxwellverteilung

$$f(|\mathbf{v}|) = \frac{m}{kT}\,|\mathbf{v}|\,\exp\left(-\frac{m\,|\mathbf{v}|^2}{2kT}\right)$$

fitten (`nlinfit`-Befehl in MATLAB) und daraus $\frac{m}{kt}$ bestimmen. Man kann aber auch $\frac{m}{kT}$ aus der mittleren Geschwindigkeit der zweidimensionalen Boltzmanngleichung bestimmen:

$$\langle|\mathbf{v}|\rangle^2 = \frac{\pi\, k\, T}{2m}.$$

(Beachten Sie, dass die Maxwellverteilung nur im Grenzfall wechselwirkungsfreier Teilchen gilt).