Stephan Wonczak (Autor)

Molekulardynamische Simulationen von Argon-Clustern

https://cuvillier.de/de/shop/publications/3611

Copyright:
Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentzsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen, Germany
Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: https://cuvillier.de

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

1.1 Keimbildung und Wachstum 2
1.2 Experimentelle Untersuchungen 3
1.3 Keimbildungstheorie 4
1.4 Simulationen 5
1.5 Aufgabenstellung 7

2 Theoretischer Teil **9**

2.1 Simulationstechniken 9
2.2 Molekulardynamische Simulationen 9
2.2.1 Zustandsgleichungen 10
2.2.2 Das Modell 11
2.2.3 Integration der NEWTON'schen Bewegungsgleichungen 13
2.2.4 Bessere Integratoren 15
2.2.5 Cluster 19
2.2.6 Thermostaten 21
2.3 Theorie der Keimbildung 22
2.3.1 Thermodynamik der Keimbildung 23
2.3.2 Kinetik der Keimbildung 25
2.3.3 Verbesserungen der klassischen Theorie 28
2.3.4 Das Keimbildungstheorem nach KASHCHIEV 29

3 Techniken **31**

3.1 Laufzeitoptimierung der Kraftberechnungen 31
3.1.1 Die naive Methode 31
3.1.2 Abgeschnittenes Potential 32
3.1.3 Programmiertechnische Laufzeitverbesserungen 35
3.1.4 Nachbarschaftslisten 42
3.2 Wände 47
3.2.1 Harte Wände 47

3.2.2 Weiche Wände 48
3.2.3 Andere Wandpotentiale 51
3.2.4 Geformte Wände 52
3.3 Periodische Randbedingungen 52
3.3.1 Das Problem 52
3.3.2 Theorie der periodischen Randbedingungen 52
3.3.3 Realisierung der periodischen Randbedingungen 55
3.3.4 Rechenzeit-Optimierung der periodischen Randbedingungen 57
3.4 Thermostat 61
3.5 Cluster-Suchalgorithmen 62
3.5.1 Der STODDARD-Algorithmus 62
3.5.2 Verbesserung des STODDARD-Algorithmus 65
3.6 Bestimmung von Dichteprofilen 68
3.6.1 Ermittlung des Massenschwerpunktes eines Clusters 68
3.6.2 Berechnung des Dichteprofils 70

4 Simulationsergebnisse 75
4.1 Test des Simulationsprogrammes 75
4.1.1 Energieerhaltung 76
4.1.2 Geschwindigkeitsverteilung 78
4.2 Simulation einer Dampfdruck-Kurve 79
4.2.1 Berechnung des Dampfdruckes 80
4.2.2 Auswertung des Dichteprofils 81
4.2.3 Bestimmung des Dampfdruckes 88
4.2.4 Korrektur des Dampfdruckes über die KELVIN-Gleichung 90
4.2.5 Eine verbesserte KELVIN-Korrektur 95
4.3 Nukleations-Experimente 97
4.3.1 Durchführung eines Keimbildungsexperimentes in der Realität 98
4.3.2 Umsetzung des realen Experiments für die Computersimulation 100
4.3.3 Erzeugung eines homogenen, untersättigten Gases 101
4.3.4 Simulation der Keimbildung 105
4.3.5 Keimbildungsrate und kritische Clustergröße 112
4.3.6 Alterung 115
4.3.7 Weitere Keimbildungsexperimente 119
4.4 Kinetische Daten 126
4.4.1 Keimbildung 127

4.4.2 Erzeugung der kleineren Cluster . . . 130
4.4.3 Bestimmung der Raten . . . 132
4.4.4 Zukünftige Anwendungsmöglichkeiten der gewonnenen Ergebnisse . . . 149

5 Zusammenfassung 153

A Verwendete Größen und Abkürzungen 157

B Dokumentation 161
B.1 Die Programmroutinen . . . 161
B.1.1 Das Hauptprogramm: `main.f` . . . 162
B.1.2 Leseroutinen . . . 162
B.1.3 Ausgaberoutinen . . . 163
B.1.4 Die Integrator-Routinen . . . 165
B.1.5 Die Kraftberechnungs-Routinen . . . 169
B.1.6 Nachbarschafts-Routinen . . . 174
B.1.7 Cluster-Suchroutinen . . . 176
B.1.8 Thermostat-Routinen . . . 177
B.1.9 Routinen zur Erzeugung von Startkonfigurationen . . . 178
B.1.10 Der Kirkpatrick-Stoll-Zufallszahlen-Generator . . . 179
B.1.11 Verschiedene Programmroutinen . . . 180
B.2 Die Variablen-Includefiles . . . 183
B.2.1 Atom-Koordinaten `atomc.inc` . . . 183
B.2.2 Atom-Parameter `atomp.inc` . . . 183
B.2.3 `boxpp.inc` . . . 183
B.2.4 `const.inc` . . . 184
B.2.5 `cvtpp.inc` . . . 184
B.2.6 `dmmpp.inc` . . . 184
B.2.7 `energ.inc` . . . 185
B.2.8 `filep.inc` . . . 185
B.2.9 `timep.inc` . . . 185
B.2.10 `connp.inc` . . . 185
B.3 Die Eingabedatei `.3d` . . . 186
B.4 Die Ausgabedateien . . . 196
B.4.1 Das Koordinatenfile `.xyz` . . . 196
B.4.2 Das Geschwindigkeitsfile `.vel` . . . 197
B.4.3 Das Beschleunigungsfile `.acc` . . . 197
B.4.4 Das Restartfile `.rst` . . . 197
B.4.5 Das Ausgabefile für Durchschnittsgrößen `.ave` . . . 197
B.4.6 Die Clustergrößenstatistik `.csi` . . . 198

B.4.7 Die Kondensations- und Verdampfungsereignis-Datei .rat 199
B.5 Die Hilfsprogramme 201
B.5.1 thinout.f
thinout <.3d> <outfile> <skip> 201
B.5.2 selclu.f
selclu <.3d> <ofile1> <ofile2> <skip> <mflag> . 201
B.5.3 sizer.f
sizer <.3d> <outfile> 202
B.5.4 mesher.f
mesher <.3d> <outfile> 202
B.5.5 veltest.f
veltest <.3d> <outfile> 203
B.5.6 pressw.f
pressw <.3d> <outfile> 203
B.5.7 marker.f
marker <.3d> <outfile> <sym1> <sym2> 204
B.5.8 press.f
press <.3d> <outfile> <num> 204
B.5.9 density.f
density <.3d> <outfile> <disc> <rstep> 204
B.5.10 sysdens.f
sysdens <.3d> <outfile> <disc> <divs> 205
B.5.11 colgas.f
colgas <.3d> <outfile1> <outfile2> <skip> . . . 206
B.5.12 rdf.f
rdf <.3d> <outfile1> <outfile2> <disc> <rstep> 206
B.5.13 timefile.f
timefile <.3d> <oufile> 207
B.5.14 makelog.f
makelog <.3d> <outfile> 208
B.5.15 bars.f
bars <.3d> <start> <end> <outfile> 208
B.5.16 reverse.f
reverse <.3d> <fout> 208
B.5.17 rate-xyz.f
rate-xyz <.3d> <outfile> 209
B.5.18 stotest.f
stotest <.3d> 209
B.5.19 ratstat.f
ratstat <infile> <thresh> 209

B.5.20 `ratstat-t.f`
`ratstat-t <scriptfile> <thresh>` 212
B.5.21 `bigcl.f`
`bigcl <.3d> <outfile> <skip>` 215
B.6 Das Makefile 216
B.6.1 `cluster`-Versionen 216
B.6.2 Hilfsprogramme 217
B.6.3 Spezielle Targets 218
B.6.4 Neue Targets 219

C Verwendete Computer und Programme **221**

Literaturverzeichnis **223**