

Computersimulationen von Vielteilchensystemen

Projekt 11: Phononentransport am Beispiel einer monoatomaren, linearen, harmonischen Kette mittels Molekulardynamik

Der Wärmetransport innerhalb eines Festkörpers ist im Wesentlichen durch die mikroskopische Wechselwirkung freier Elektronen und von Gitterschwingungen (Phononen) bestimmt. Zur Beschreibung des phononischen Beitrags wird die Dynamische Matrix verwendet, deren Eigenwerte den Eigenfrequenzen der Phononen entsprechen. In diesem Projekt soll der phononische Transport am einfachen Beispiel einer monoatomaren Kette erfolgen.

Durchführung:

- Schreiben Sie ein Programm, welches eine monoatomare, lineare Kette mit periodischen Randbedingungen und harmonischer Nächste-Nachbar-Wechselwirkung im NVT-Ensemble simuliert. Verwenden Sie hierfür den Velocity-Verlet-Algorithmus [1] und einen Langevin-Thermostat [4].
- Erweitern Sie Ihr Programm um eine Routine zur Berechnung der Dynamischen Matrix im reziproken Raum. Bestimmen Sie damit die Phononen Dispersionsrelation [2].
- Schreiben Sie ein weiteres Programm zur Bestimmung der Phononentransmission. Transformieren Sie dafür die berechnete Dynamische Matrix zurück in den Realraum und nutzen Sie den Greens-Formalismus [3].

Literatur:

- [1] D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*, Academic Press (1996), Kapitel 4.1/4.2
- [2] L. T. Kong, *Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations*, Computer Physics Communications **182**, 2011
- [3] W. Zhang, T. S. Fisher, N. Mingo, *The Atomistic Green's Function Method: An Efficient Simulation Approach for Nanoscale Phonon Transport*, Numerical Heat Transfer, 2007
- [4] https://en.wikipedia.org/wiki/Langevin_dynamics