



# Molekulare Simulation von Poiseuilleströmungen zwischen Graphitplatten



**ITT - Institutsseminar**

Martin Horsch

19. Juni 2008

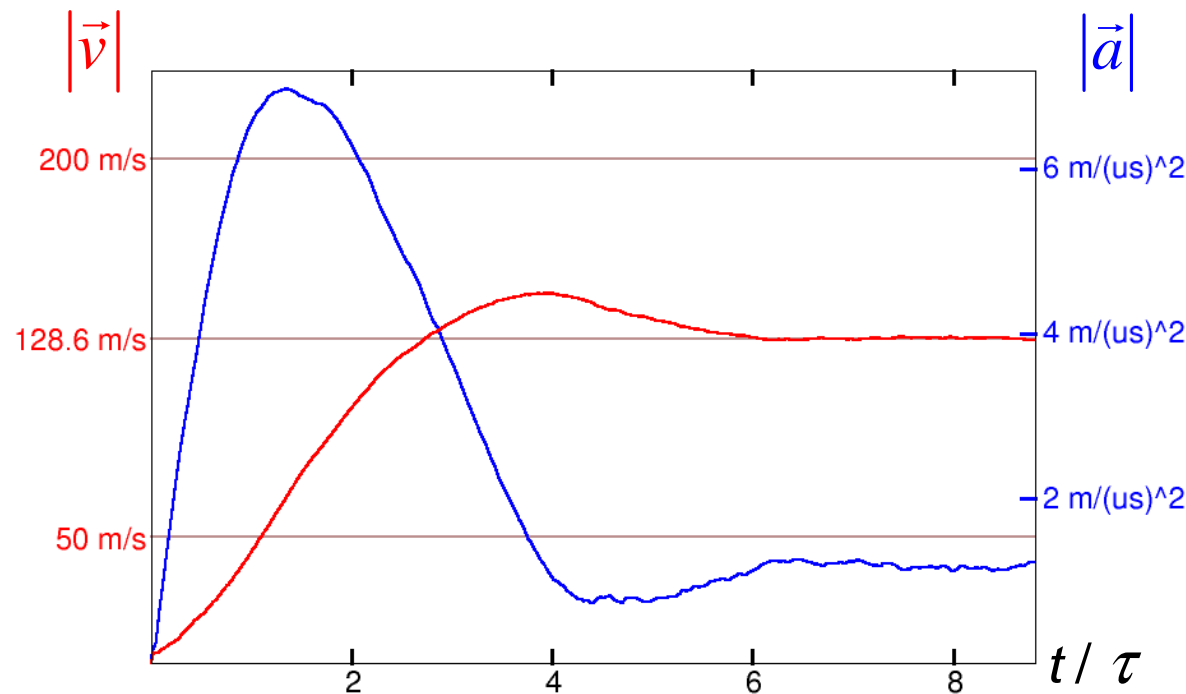
## Simulation nanoskaliger Kanäle: Projektziele

- Wandstruktur der Kanäle aus Kohlenstoff und Silizium
  - Ebene Geometrie: z. B. Graphit und Graphen
  - Zylindrische Geometrie: z.B. Kohlenstoffnanoröhren
  - In erster Förderperiode charakteristische Längen bis zu 100 nm
- Durch gleichförmige Beschleunigung gesteuerte Strömungen
  - Poiseuilleströmung: zusätzliche Kraft wirkt auf das Fluid
  - Couetteströmung: zusätzliche Kraft wirkt auf den Festkörper
- Erweiterung des **Molekulardynamik**-Programms *mardyn*
  - ... um die Regelung von Strömungssimulationen
  - ... um das molekulare Modell für die Wand

# Implementierung der Strömungssimulation

Ziel: Geschwindigkeit  $\vec{v}_{\text{Ziel}}$  bei möglichst stabiler Beschleunigung  $\vec{a}$

Anpassung der Beschleunigung 
$$\frac{d\vec{a}}{dt} = \frac{\vec{v}_{\text{Ziel}} - \vec{v}}{\tau^2} - \frac{d\vec{v}}{\tau dt}$$



Energiesenke *nur hier*:  
isokinetischer Thermostat

$\tau = 10 \text{ ps}$   
 $N = 130000$   
 $|\vec{v}_{\text{Ziel}}| = 128,6 \text{ m/s}$

10,0 mol/l Methan (LJ-Fluid) bei 300 K

## Tersoffpotential für Kohlenstoff und Silizium

Mehrkörperpotential *in der Form eines Paarpotentials*:

$$u_{ij} = c(r_{ij}) \cdot (Ae^{-\lambda r_{ij}} - b_{ij}Be^{-\mu r_{ij}})$$

Mehrkörperterm:

Der Attraktionskoeffizient  $b_{ij}$  berücksichtigt die Bindungswinkel  $\theta_{ijk}$  zu benachbarten Zentren  $k$ .

Stetige Ausblendung im Intervall  $R \leq r_{ij} \leq S$  durch den Cutoffterm:

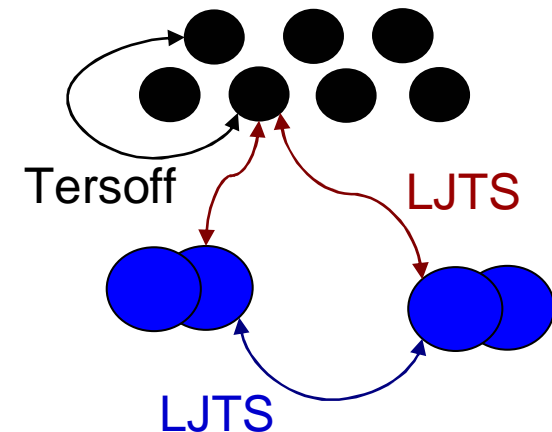
$$c(r_{ij}) = \frac{1}{2} \left( 1 + \cos \left( \frac{\pi(r_{ij} - R)}{S - R} \right) \right) \approx \left( \frac{S - r_{ij}}{S - R} \right)^2 \cdot \left( 3 - \frac{2(S - r_{ij})}{S - R} \right)$$

... für Kohlenstoff ist  $R = 1,8 \text{ \AA}$  und  $S = 2,1 \text{ \AA}$ .

# Simulationen mit dem Tersoffpotential

- **Nachbarschaftslisten**

- Tersoffpotential betrachtet alle benachbarten Tripel. Deshalb:
  - 1) in *bins* mit Kantenlängen der Größenordnung von  $r_c$  einsortieren
  - 2) Paarpotentiale auswerten, Liste erstellen
  - 3) Tersoffpotential auswerten

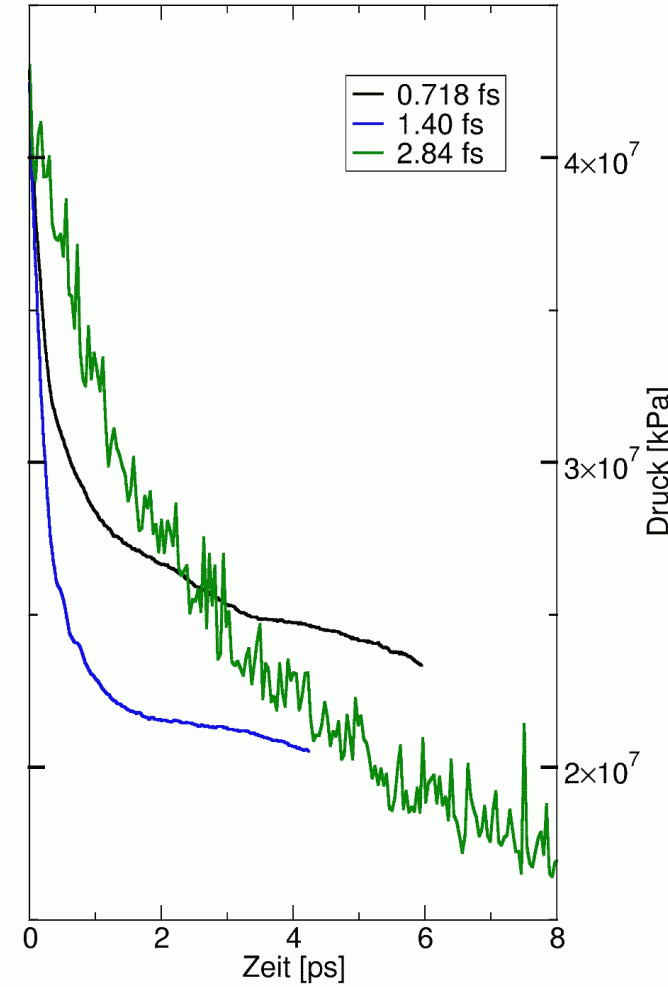
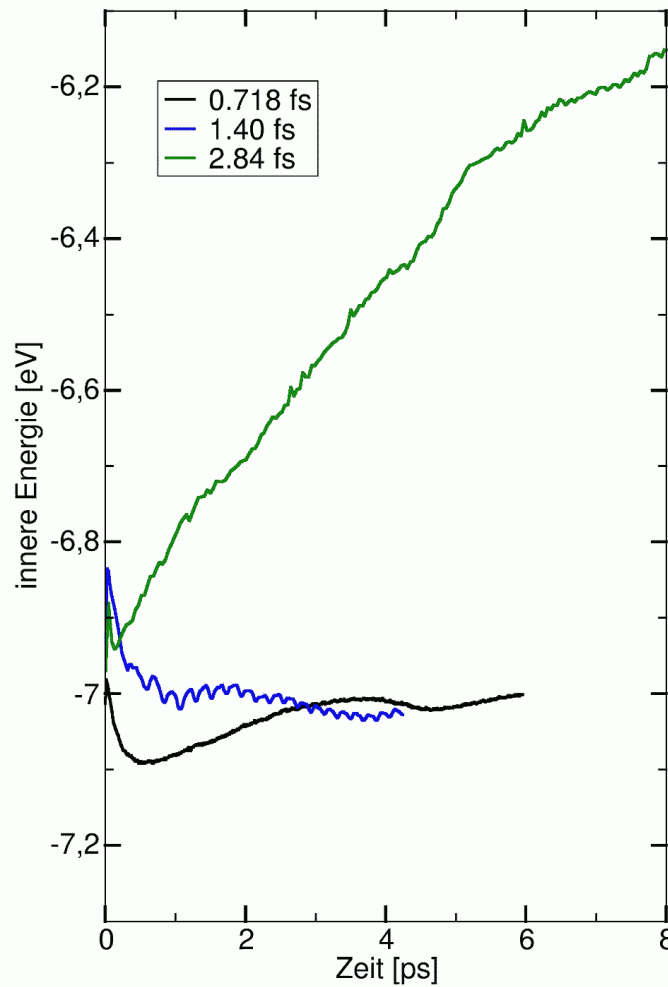


- **Fluid-Wand-Wechselwirkung**

- **Integrator**

- Abschneideradius  $S$  des Tersoffpotentials ist sehr kurz (C: 2,1 Å)
- Exponentielle Terme für Attraktion und Repulsion, dichtes System
- *Wie weit müssen wir den Simulationszeitschritt reduzieren?*

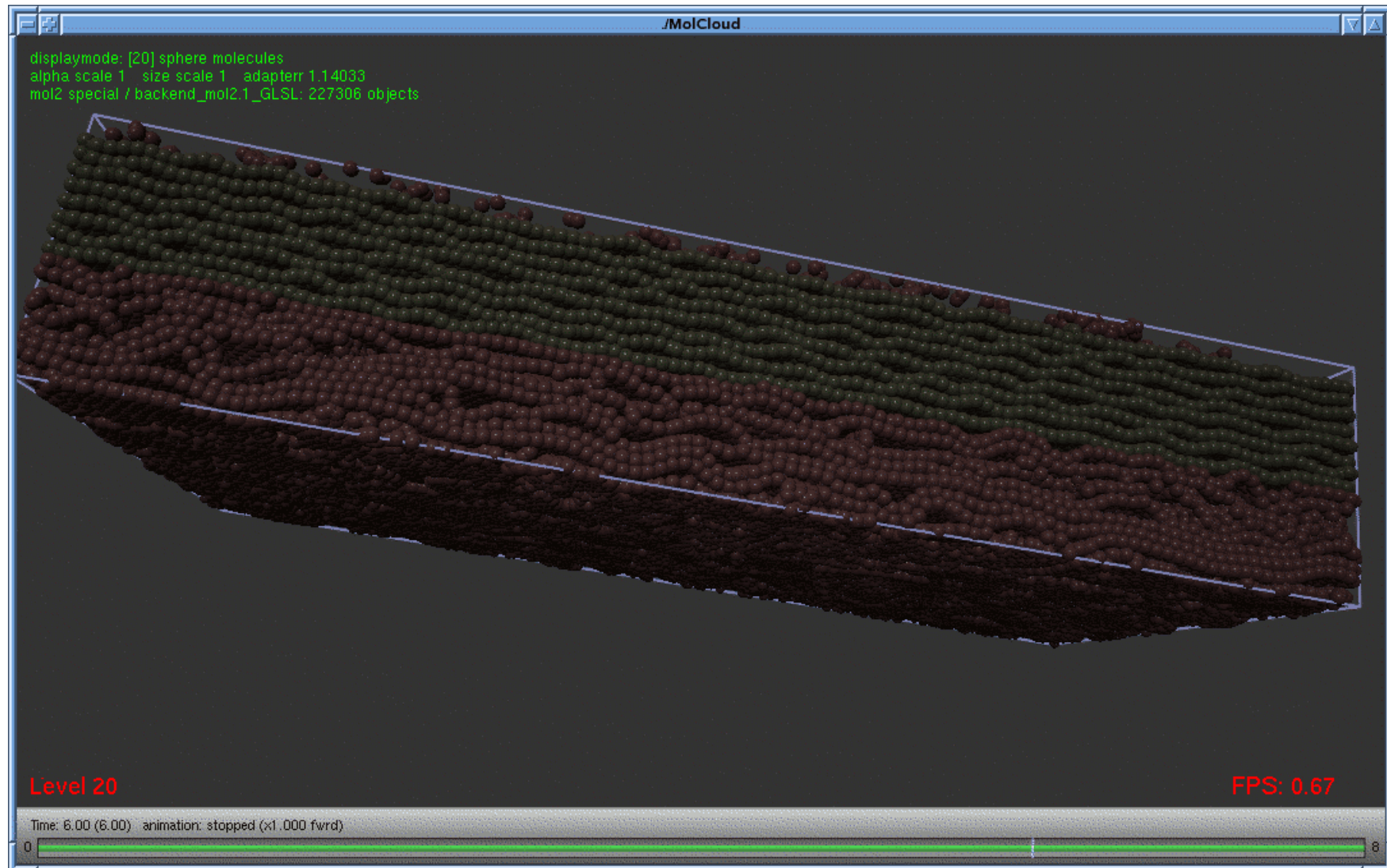
# Simulationszeitschritt



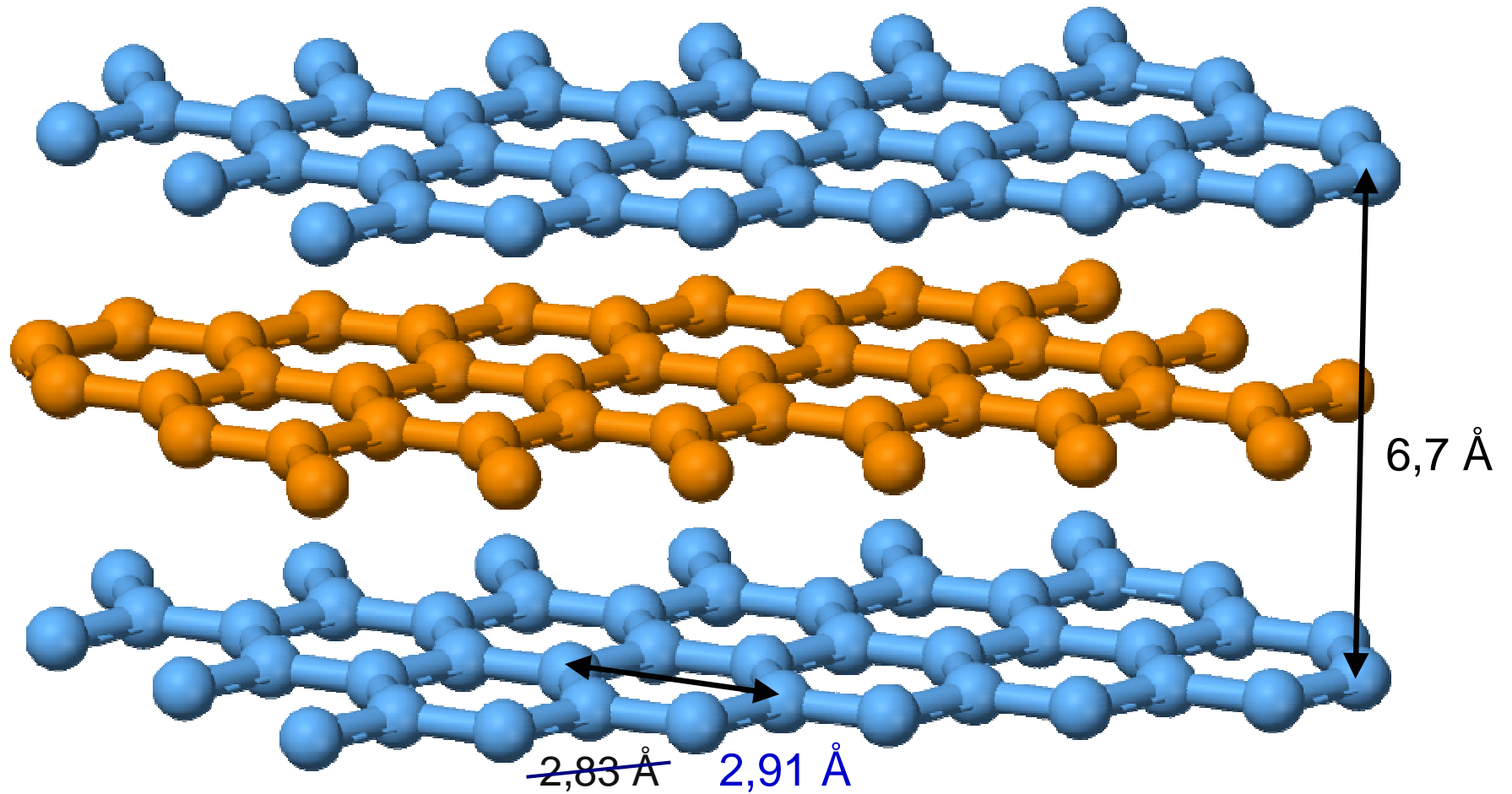
Der Zeitschritt muss auf 1 fs reduziert werden.



# Simulation von Graphitplatten (I)

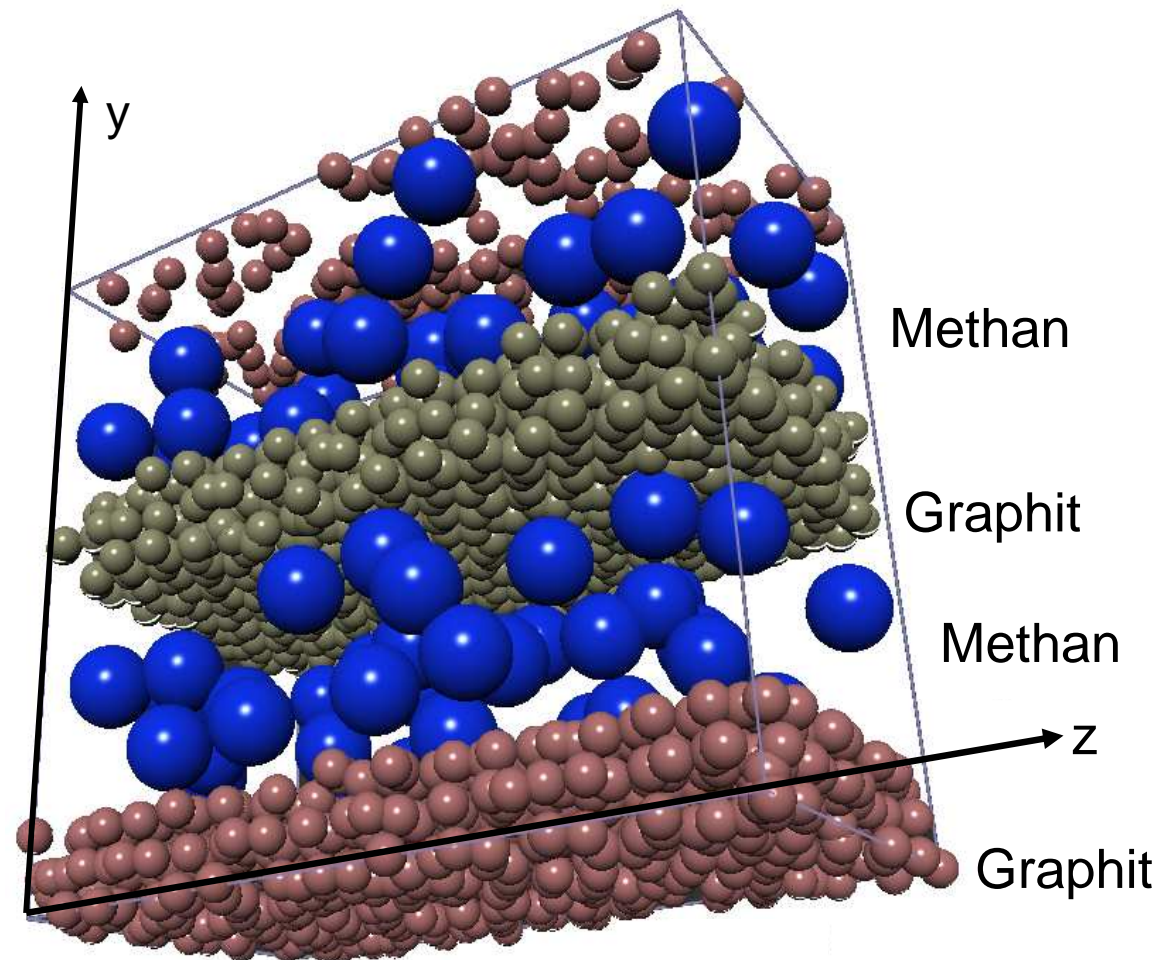


# Initialkonfiguration



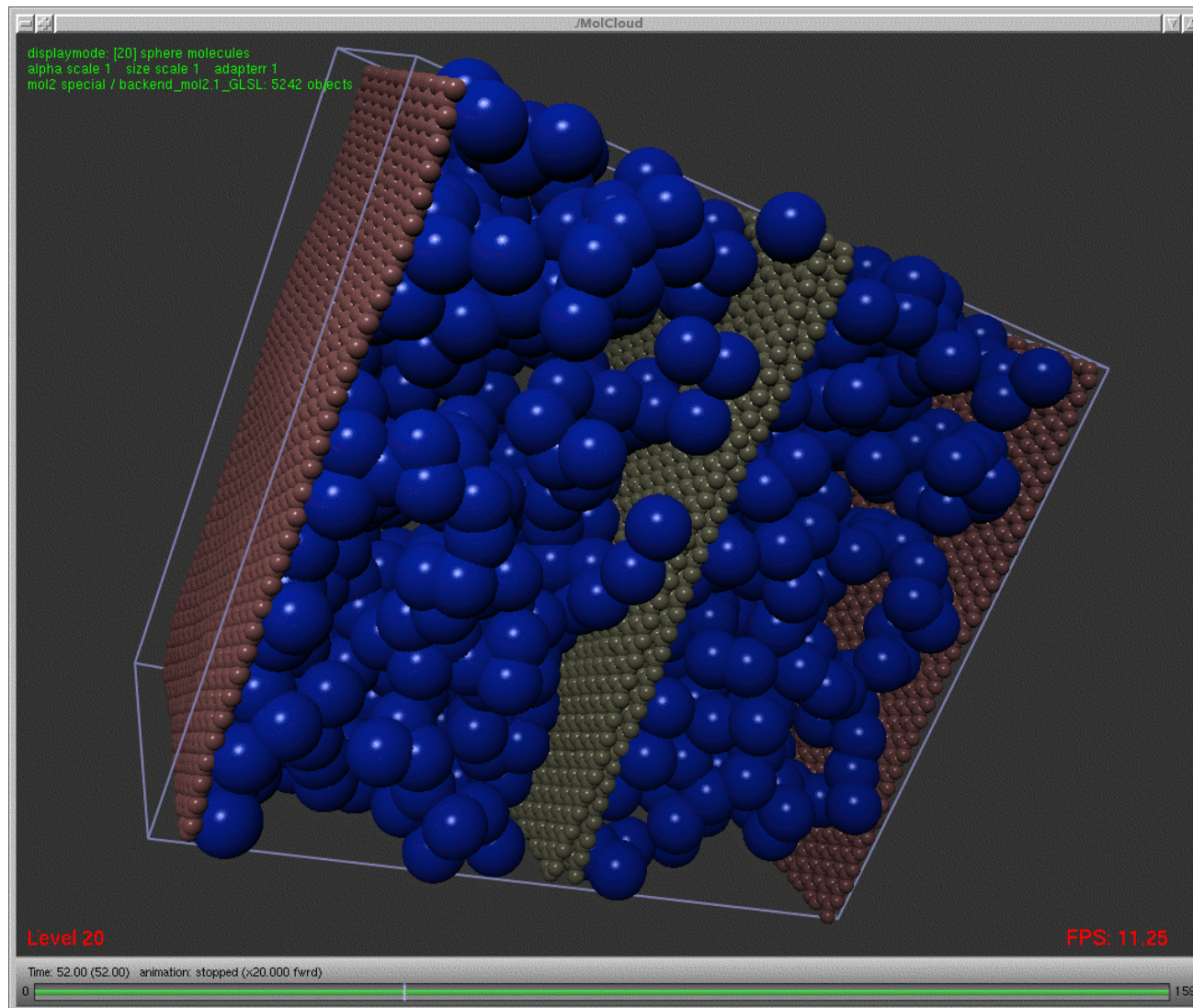


## Szenario



Das Methan soll in z-Richtung beschleunigt werden.

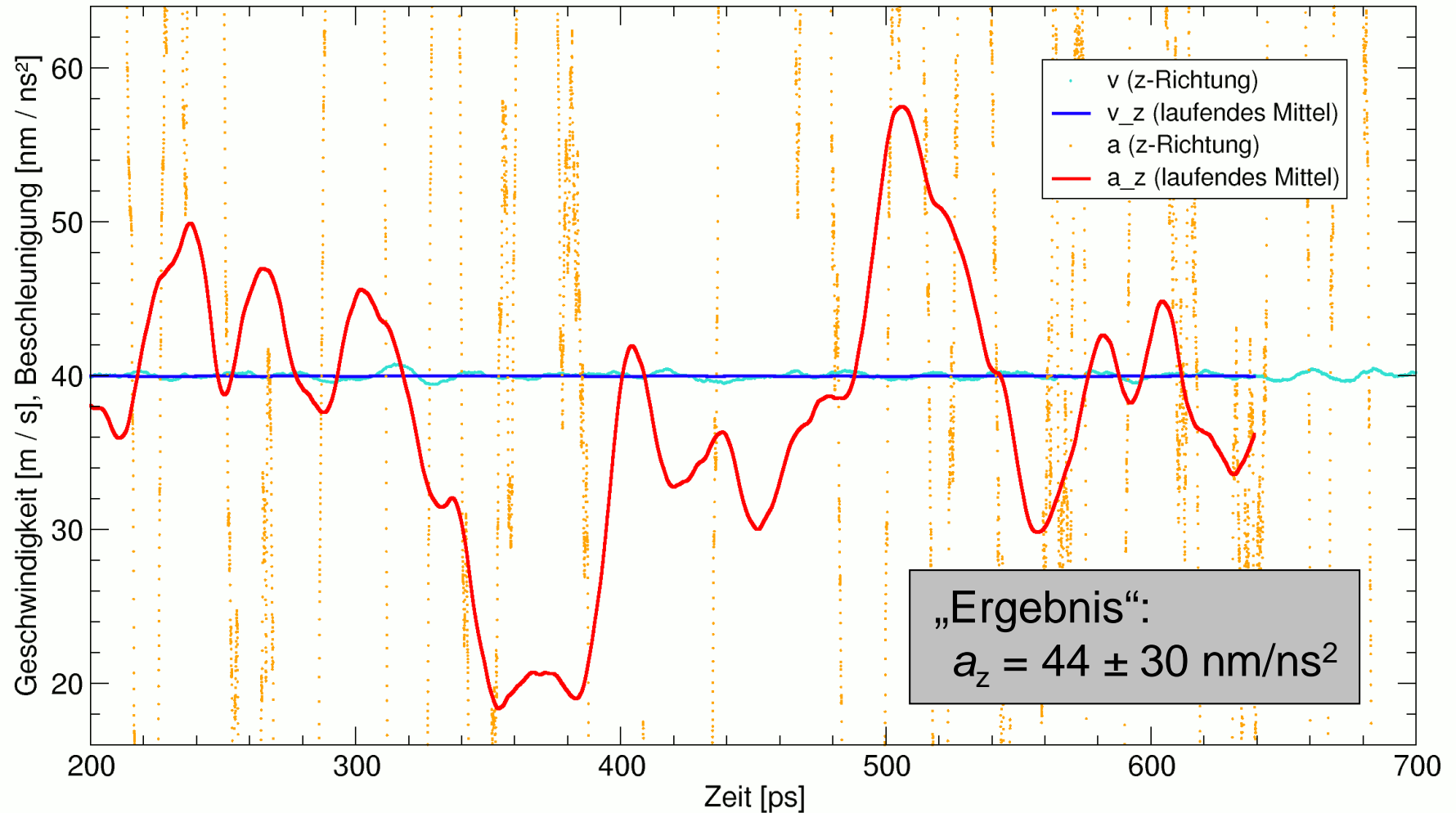
## Simulation von Graphitplatten (II)





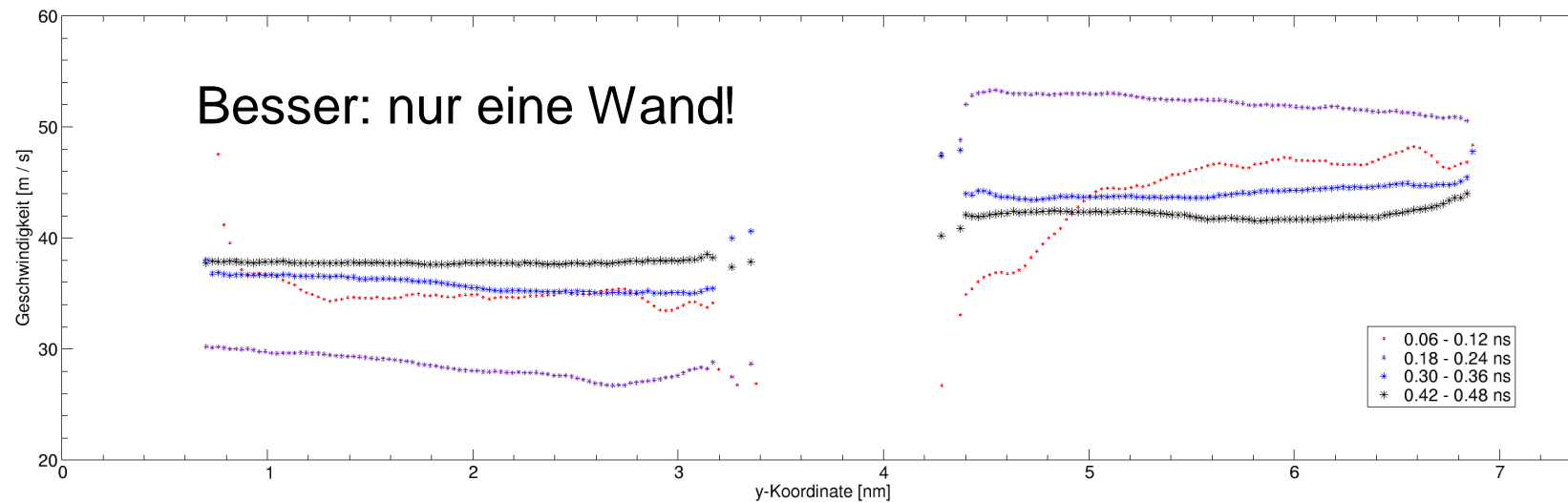
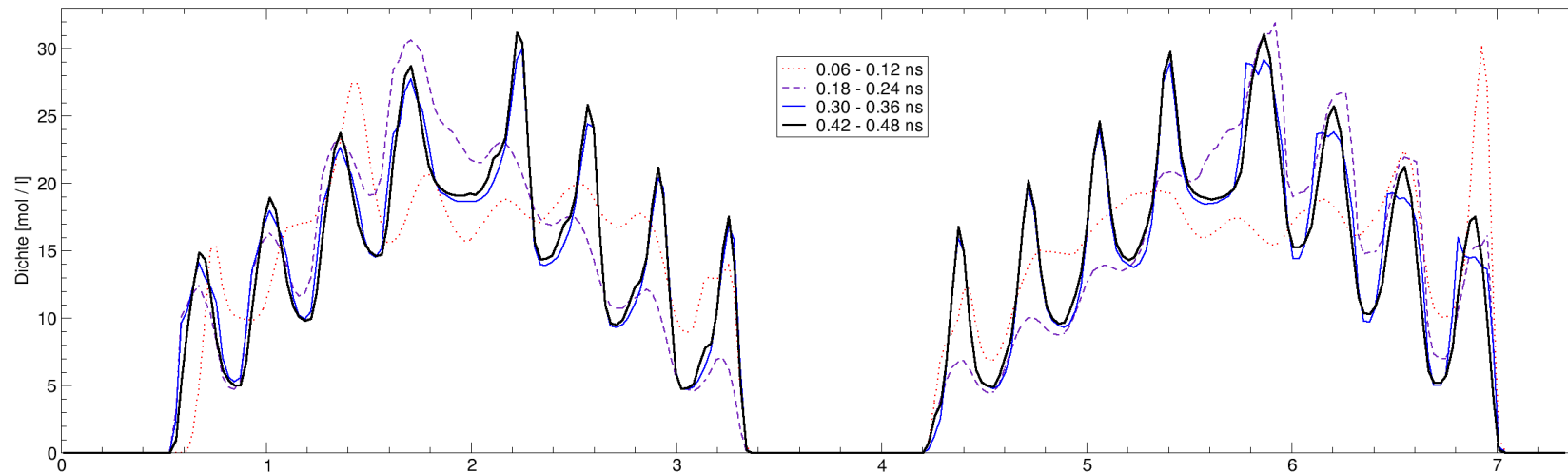
# Simulation: Beschleunigung

Methan (LJTS), 175 K, 18.4 mol/l, 300 nm Plattenabstand, 40 m/s

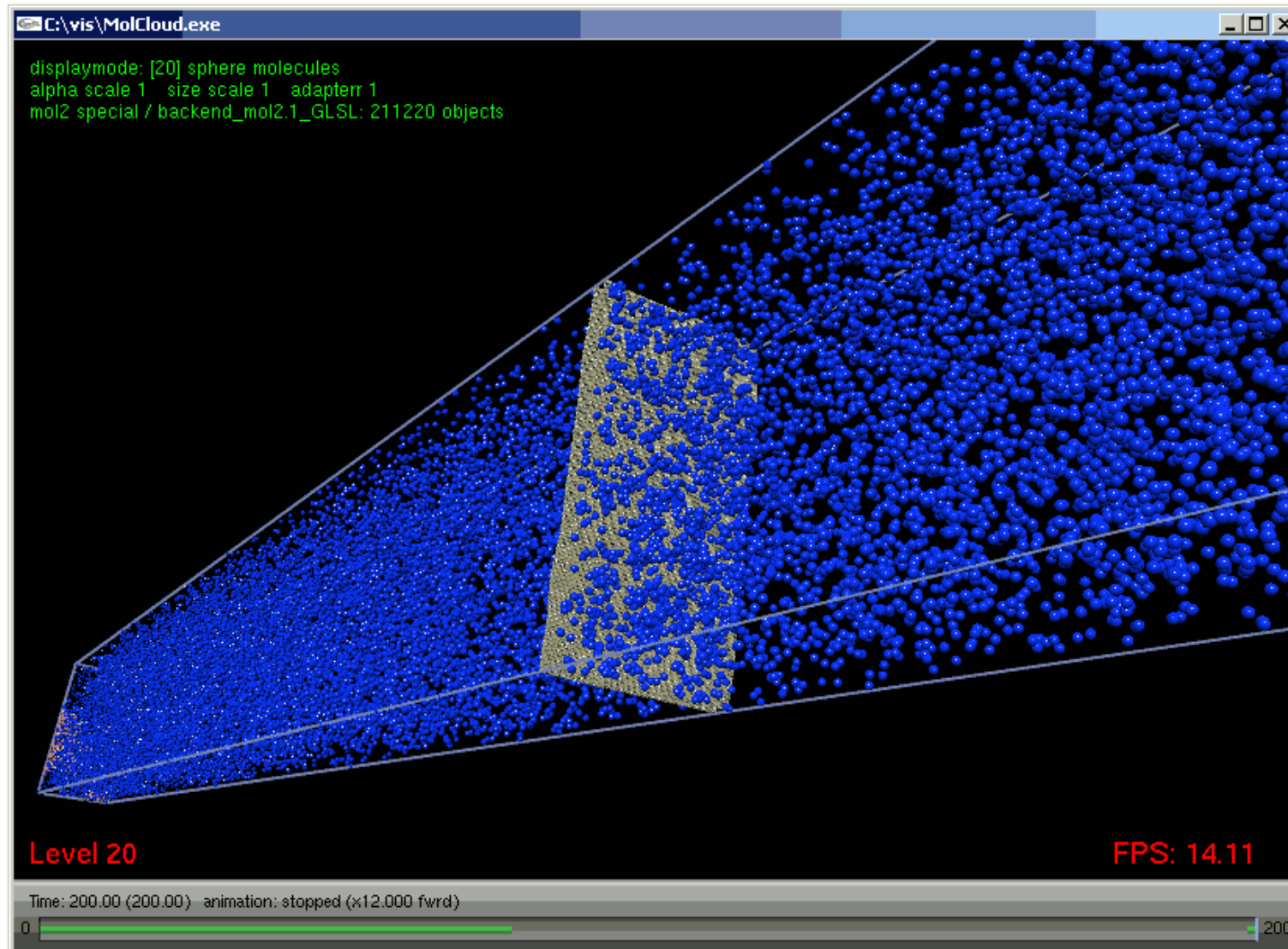


# Simulation: Dichte- und Geschwindigkeitsprofil

Methan, 175 K, 18.4 mol/l, 3 nm Plattenabstand, 40 m/s

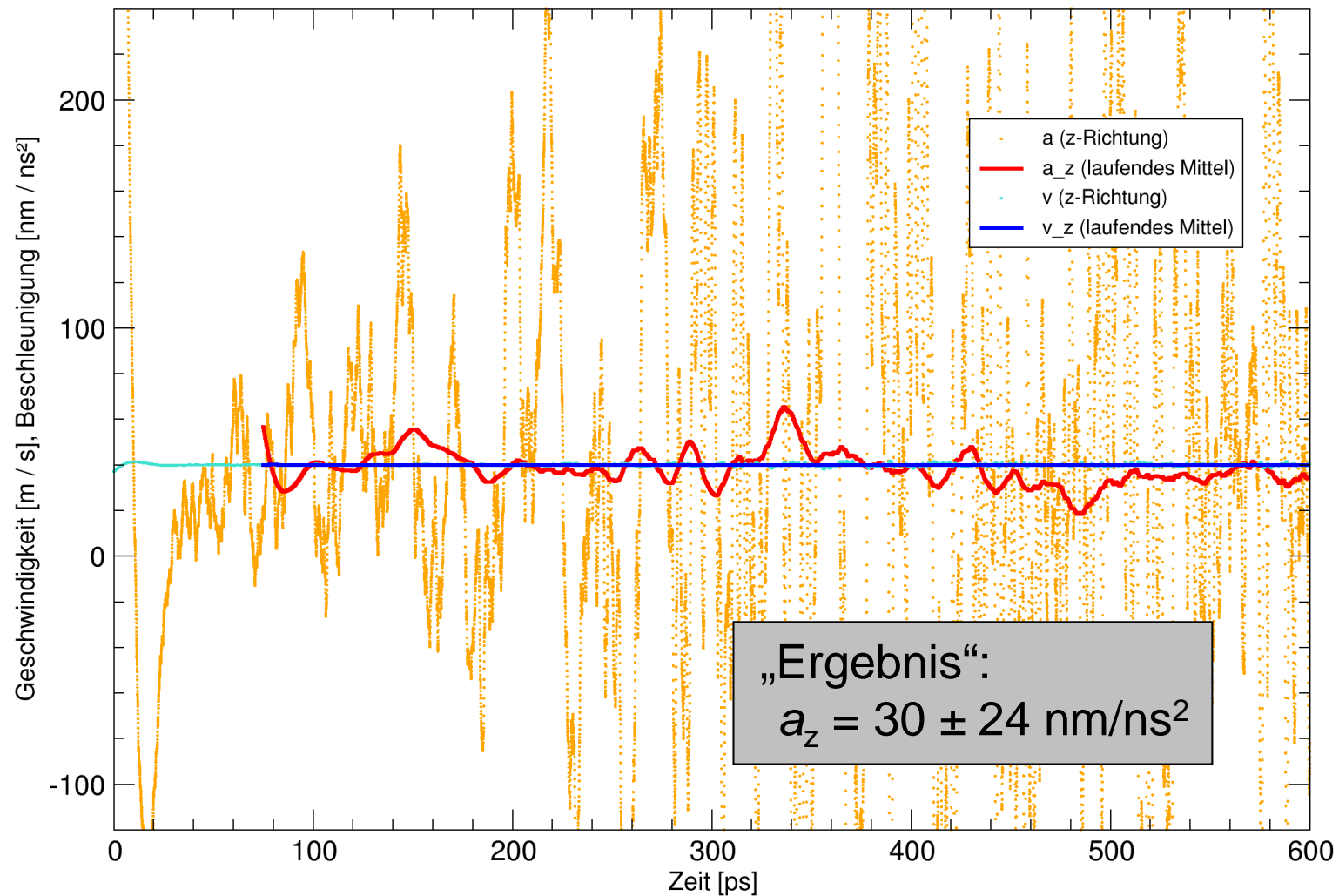


# Poiseuilleströmung von Methangas: Simulation



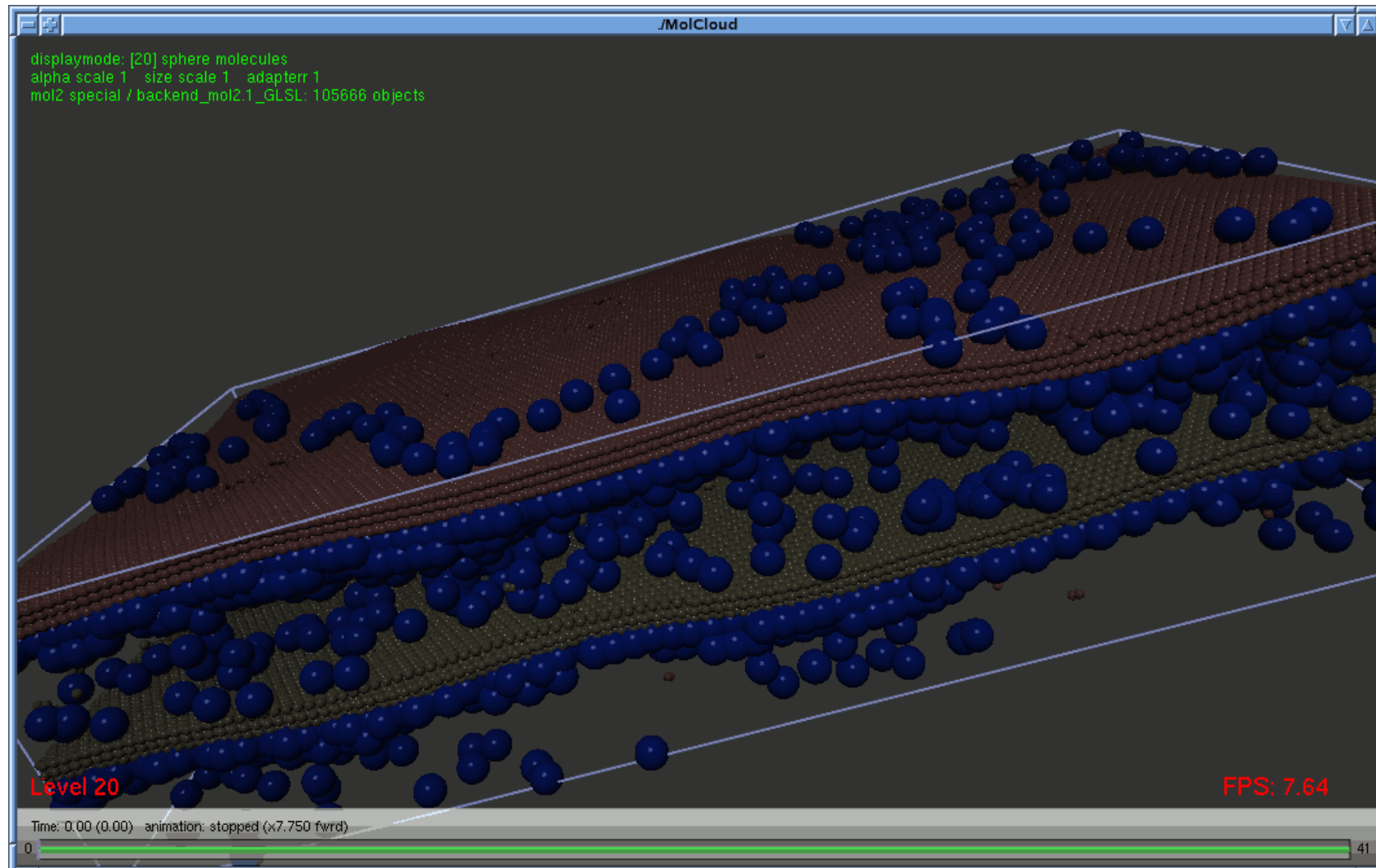
# Poiseuilleströmung von Methangas

Methan (LJTS), 125 K, 0.186 mol/l, 300 nm Plattenabstand, 40 m/s



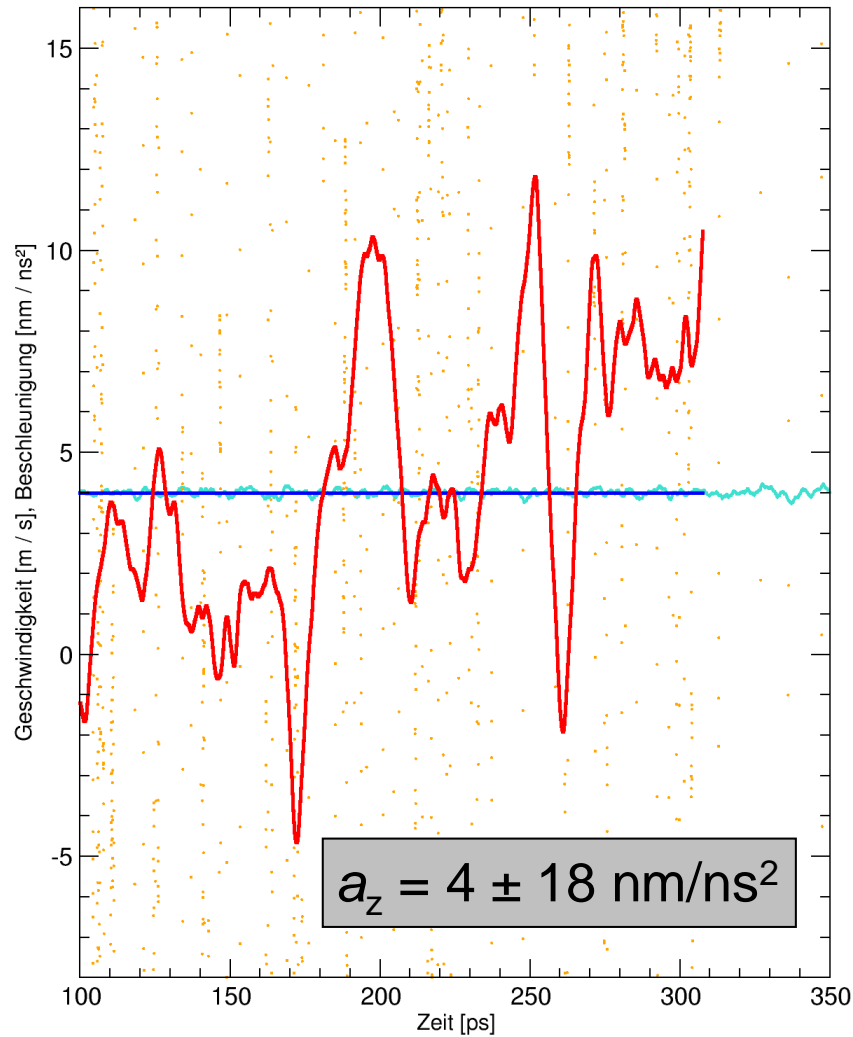


# Strömung mit Fluid im Nassdampfgebiet

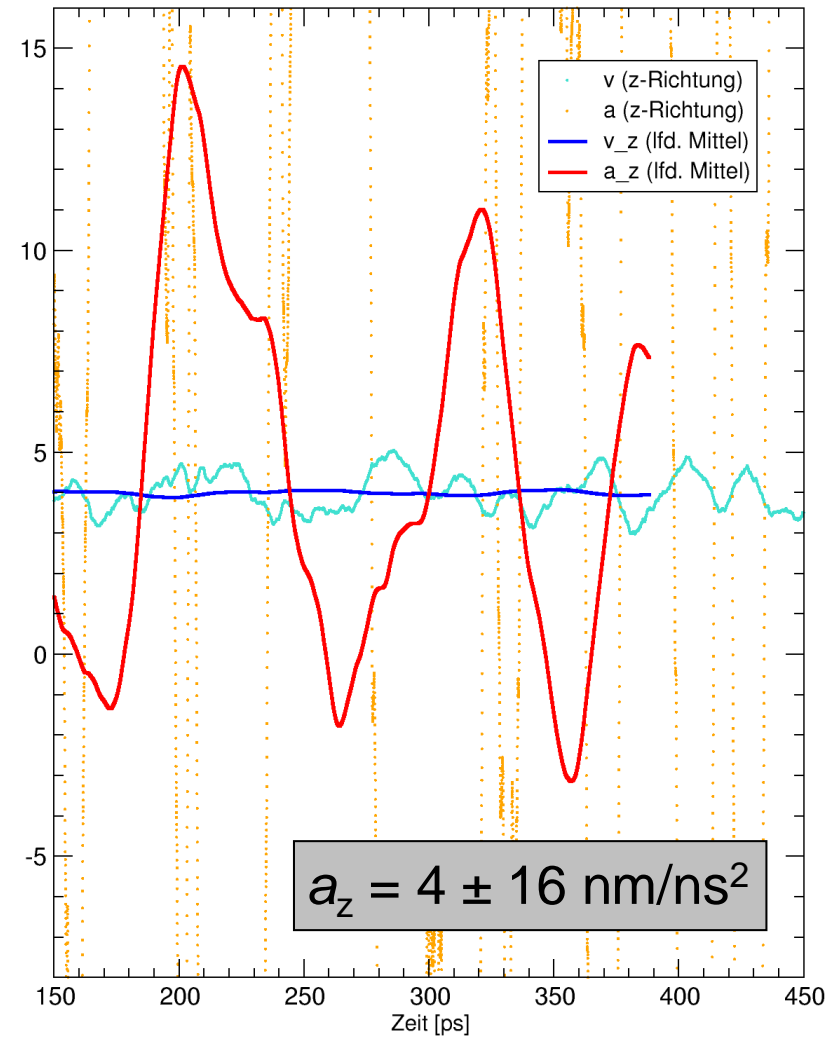


# Einfluss des Zeitparameters

Methan (LJTS), 175 K, 2.02 mol/l, 300 nm Plattenabstand, 4 m/s, tau = 1.5 ps



Methan (LJTS), 175 K, 2.02 mol/l, 300 nm Plattenabstand, 4 m/s, tau = 15 ps



## Probleme und notwendige Korrekturen

### unklare Modellparameter

1. Ansatz: Korrelation Randwinkel  $\varepsilon_{FW}/\varepsilon_{FF}$   
Anpassung  $\varepsilon_{FW}$  an Experimente
2. Ansatz: GAMESS  
Unmittelbar: Rechnungen bei 250 und 350 K  
Exzess-Bindungslänge auf 0,5%

### hohe Ungenauigkeit für $a_z$

Zeitparameter  $\tau$  deutlich erhöhen  
Falls erforderlich auch konstantes  $a_z$

### Wandbeschleunigung

Getrennte Bereiche getrennt beschleunigen  
Ähnlich: innere und äußere Schichten

### ineffiziente Implementierung

Ausblendung als Polynom statt cos  
Nachbarn nicht jeden Zeitschritt bestimmen  
Zeitschritt für LJ-Potential vervielfachen  
Integration der dynamischen Lastbalancierung

## Zusammenfassung

- Das MD-Programm *mardyn* wurde um das Festkörpermodell von Tersoff und um eine Strömungsregelung erweitert.
- MD-Simulationen von Poiseuilleströmungen mit Kanaldurchmessern von 300 nm sind bereits jetzt möglich. (Projektziel: 100 nm)
- Die Modellparameter müssen noch an QM-Berechnungen oder Experimente angepasst werden.
- Durch Optimierungen bei der Tersoff-Implementierung, unterschiedliche Zeitschritte, dynamische Lastbalancierung etc. ist eine erhebliche Reduktion der Rechenzeit möglich.