

Ch A 16/07 Ki_Online-Ergänzung

Simulation der Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung einer Gasportion mit der Freeware »jMD1«

////////////////////////////////////
WOLFGANG KIRSCH
////////////////////////////////////

Online-Ergänzung



Simulation der Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung einer Gasportion mit der Freeware »jMD1«

WOLFGANG KIRSCH

1 Vorbereitung

- 1.1 Laden Sie von der Website mit der Internetadresse http://home.fhtw-berlin.de/~djoensso/jMD_HTML/mo-1e.html den gepackten Ordner *jMD1.zip* auf Ihren Windows®-Computer.
- 1.2 Entpacken Sie den Ordner und starten Sie die ausführbare Datei *jMD_1* (Dreidimensionale Molekulardynamik, Version 1). Das Programm lässt sich ohne weitere Installation sofort starten.
- 1.3 Erstellen Sie eine Tabelle mit den Schaltern, Einstellungsmöglichkeiten sowie Optionen und Funktionen der Simulation, die auf dem Startbildschirm der Simulation und im Darstellungsfenster der Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung (hierzu auf den Maxwell-Schalter [Maxwell] klicken) sichtbar sind.

2 Simulation 1

- 2.1 Simulieren Sie eine Gasportion Xenon mit 64 Teilchen und eingeschalteten Vektoren. Beobachten Sie einige Zeit nach dem Start das »rote Teilchen« allein und analysieren Sie den Startvorgang und anhand des Verhaltens des roten Teilchens den Vorgang des Zusammenstoßes der Teilchen.
- 2.2 Starten Sie die Simulation mit einer Gasportion Xenon mit 64 Teilchen und eingeschalteten Vektoren. Erhöhen Sie die Temperatur von 25 °C auf 2000 °C und beobachten Sie dabei auch das rote Teilchen allein; schalten Sie hierzu die Funktion »rot-Spur« ein. Erläutern Sie, inwiefern sich die Simulation bei einer Temperatur von 2000 °C von einer Simulation bei einer Temperatur von 25 °C unterscheidet.
- 2.3 In der Simulation ist bei der Einstellung der Teilchenzahl von Molekülen die Rede. Beurteilen Sie diesen Sachverhalt im Hinblick auf die angebotenen Gase.

3 Simulation 2

- 3.1 Rufen Sie den Startbildschirm der Simulation auf und wählen Sie eine Gasportion Xenon mit 64 Teilchen. Klicken Sie auf den Maxwell-Schalter und starten Sie die Simulation. Beobachten Sie die dargestellte Geschwindigkeitsverteilung mindestens drei Minuten. Erläutern Sie die Entwicklung des Diagramms (Geschwindigkeitsverteilung) im Verlauf der Zeit.
- 3.2 Rufen Sie den Startbildschirm der Simulation auf und wählen Sie eine Gasportion Xenon mit 1000 Teilchen. Klicken Sie auf den Maxwell-Schalter und starten Sie die Simulation. Beobachten Sie die dargestellte Geschwindigkeitsverteilung etwa drei Minuten. Fertigen Sie für beide Fälle eine »Bildschirmhardcopy« der Geschwindigkeitsverteilung an. Erläutern Sie die Entwicklung des Diagramms (Geschwindigkeitsverteilung) im Verlauf der Zeit. Vergleichen Sie den Unterschied zur Darstellung mit 64 Teilchen.
- 3.3 Simulieren Sie eine Gasportion Xenon mit 64 Teilchen. Klicken Sie auf den Maxwell-Schalter und starten Sie die Simulation. Halten Sie die Simulation nach drei Minuten an und fertigen Sie eine Bildschirm-Hardcopy an. Starten Sie die Simulation mit den gleichen Einstellungen und der Maxwell-Darstellung erneut und erhöhen Sie eine Minute nach Start der Simulation die Temperatur auf 2000 °C. Fertigen Sie nach drei Minuten Simulation erneut eine Bildschirm-Hardcopy an. Vergleichen Sie die Kurvenformen der beiden Geschwindigkeitsverteilungen bei 25 °C und 2000 °C.

Hinweise zur Erstellung einer »Bildschirm-Hardcopy« (Screenshot):

Um eine Bildschirm-Hardcopy (Bildschirmaufnahme) zu erstellen, drücken Sie die Tasten [Strg] und [Druck] Ihrer Tastatur gleichzeitig. Legen Sie dann ein neues Textdokument an und klicken im Popup-Menü »Bearbeiten« der Textverarbeitung die Option »Einfügen« an. Die Bildschirmaufnahme wird dann im Textdokument als Abbildung sichtbar.



Lösungshinweise

1 Vorbereitung

Tab. 1. Schalter, Einstellungsmöglichkeiten sowie Optionen und Funktionen des Simulationsprogramms „JMD1“ auf dem Startbildschirm und im Darstellungsfenster der Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung

[Schalter], Einstellung	Option, Funktion	
[Start], [Neu-Start]	Starten bzw. Neustarten der Simulation	
Popup-Schalter: Luftähnlich (als einatomiges Gas idealisiert), He, Ne, Ar, Kr, Xe	Auswahl des Gases	
[Gas Info]	Information zum gewählten Gas	
[Th.dyn. Info]	Anzeige von Temperatur, Druck und Entropie für den stationären Gleichgewichtszustand (= bei Maxwell-Verteilung)	
S	Absolute molare Entropie im Gleichgewichtszustand	
V_0	Volumen des Würfels beim Neustart	
Popup-Schalter: Teilchenanzahl	8, 64, 216, 512, 1000	
Popup-Schalter: Mittlerer Abstand in Teilchendurchmesser-Einheiten (entspricht Gasdichte)	2, 3, 5, 8, 10, 15	
[Vektoren]	(Richtung und Geschwindigkeit der Teilchen) sichtbar, unsichtbar	
[Halt]	Stopp der Simulation mit der weiteren Option [Schritt] und [Weiter]	
[Schritt]	Simulation wird bei Click auf den Schalter schrittweise durchgeführt. 1 Simulationsschritt entspricht 0,258 Pico-Sekunden.	
[Weiter]	Angehaltene Simulation wird bei Click auf den Schalter fortgeführt	
[Temp+], [Temp-]	Einstellung der Temperatur im Bereich von $-273,15^\circ\text{C}$ bis 3000°C	
[Volumen ändern]	Isotherm (x, y, z), isentrop (x, y, z) mit Schalter für einstellrichtung	
[nur rot]	Nur die Bewegung des einzelnen roten Teilchens wird angezeigt, die übrigen Teilchen sind noch existent aber ausgeblendet und können durch Klick auf den Schalter [alle zeigen] wieder eingeblendet werden	
[rot — Spur]	Wegspur des roten Teilchens wird angezeigt	
{Ansicht}	An/aus: Einstellungsmöglichkeiten für die Darstellung des Reaktionsgefäßes werden sichtbar oder ausgeblendet	
[<=]	Würfel (Reaktionsgefäß) drehen mit Auswahl der [x], [y], [z]-Richtung)	
[s]	Kugel wird Schattiert dargestellt: bewirkt 3-D-Eindruck,	
[#]	Hintergrund schwarz/weiß	
[0]	Startposition der Teilchen	
[2D]	3 bis 300 Teilchen stoßen als Scheiben in einer Ebene (zweidimensional) zusammen	
[x] frei lassen	Kugeln werden nicht an der Gefäßwand reflektiert sondern diffundieren frei in den Raum	
[Maxwell]	Anzeige der Maxwell Geschwindigkeitsverteilung	

Tab. 2. Einstell- und Steuerungsmöglichkeiten des Simulationsprogramms „jMD1“ im Fenster der Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung

[Schalter], Einstellung	Option, Funktion	
[~], [~]	Darstellung der Geschwindigkeitsverteilung als Stabdiagramm oder als Histogramm	
Anzahl je Klasse [ja], [nein]	Anzahl der Teilchen, die zu einer bestimmten Geschwindigkeitsklasse gehören, wird angezeigt, wenn „ja“ auf dem Button sichtbar ist.	
rot [ja], [nein]	Die Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung für unendlich viele Teilchen wird zum Vergleich dargestellt, wenn „ja“ auf dem Button sichtbar ist.	
[ohne] [mit] Zeitmittelung	Darstellung der Säulen/des Histogramms mit/ohne Zeitmittelung	
[Info]	Kurzgefasste Informationen zur dargestellten Maxwell-Verteilung	

Simulation 1

- 2.1** Beim Start streben alle Teilchen mit gleicher Geschwindigkeit, erkennbar an der gleichen Vektorlänge, dem Mittelpunkt des würfelförmigen Reaktionsgefäßes zu, wo sie dann zusammenprallen und wie zufällig mit unterschiedlicher Geschwindigkeit, erkennbar an der unterschiedlichen Vektorlänge, nach allen Richtungen auseinander streben. Nachdem sie an den Wänden des Reaktionsgefäßes reflektiert werden, durchmischen sie sich weiter, wobei sie unterschiedliche Richtungen und Geschwindigkeiten nach jedem Zusammenstoß einnehmen. Die Tatsache, dass die Teilchen beim Start auf einen Punkt mit gleicher Geschwindigkeit zustreben, ist vom Programmierer der Simulation zur schnellen Durchmischung der Teilchen vorgesehen. Beim Zusammenstoß tauschen die Teilchen Geschwindigkeit und Richtung aus, was man deutlich bei der Beobachtung des Vektors des einzelnen roten Teilchens und auch aller Teilchen sieht. Dass der Ablauf eines Zusammenstoßes zweier Teilchen zufällig erfolgt, erkennt man an der unregelmäßigen Wegespur des roten Teilchens bei Ausblendung der übrigen Teilchen.
- 2.2** Nach Erhöhung der Temperatur auf 2000°C werden die Teilchen schneller bewegt, erkennbar an den deutlich längeren Vektoren.
- 2.3** Luft besteht hauptsächlich aus Sauerstoff- und Stickstoffmolekülen, d.h. bei der Einstellung „luftähnlich“ trifft der Begriff „Moleküle“ zu. Helium, Neon, Argon, Krypton und Xenon sind jedoch Edelgase, die einatomig vorliegen. In diesem Zusammenhang von Molekülen zu reden ist falsch.

Simulation 2

Beim Start der Simulation ist bei der Geschwindigkeitsverteilung nur eine Säule (Geschwindigkeitsklasse) in der Mitte der X-Achse sichtbar, wobei sich schnell sieben weitere Säulen bilden und die mittlere Säule niedriger wird.

Die gleiche Anfangsgeschwindigkeit der Teilchen wird von der anfangs sehr hohen mittleren Säule repräsentiert. Dadurch, dass die Teilchen im Reaktionsgefäß zusammenstoßen, nehmen sie andere Geschwindigkeiten an und werden in der Geschwindigkeitsverteilung anderen Geschwindigkeitsklassen zugeordnet, deren Säulenhöhen ansteigen. Somit ergibt sich ein charakteristisches Histogramm, das auch über eine lange Zeit stabil bleibt.

3.2 Die Darstellung mit 1000 Teilchen hat weitaus mehr Geschwindigkeitsklassen (32). Dadurch ist das Diagramm feiner aufgelöst und nähert sich optisch der Geschwindigkeitsverteilung mit unendlich vielen Teilchen an (rote Kurve).

3.3 Bei 2000°C ist die Geschwindigkeitsverteilung bei niedrigen Geschwindigkeitsklassen flacher und bei höheren Geschwindigkeitsklassen werden die Säulen höher, da es mehr Teilchen mit erhöhter Geschwindigkeit gibt.

Literatur

JOENSSON, D., (2007). Zur Molekulardynamik-Simulation idealer Gase in dreidimensionaler Echtzeitbewegung. Berlin, Hochschule für Technik und Wirtschaft.

JOENSSON, D., (2007). jMD 1, Version 1.0, (Dreidimensionale Molekulardynamik (Version 1) Berlin: Hochschule für Technik und Wirtschaft.

JOENSSON, D. (2007). http://home.fhtw-berlin.de/~djoensso/jMD_HTML/mo-1a.html (25.09.2016)

JOENSSON, D. (2007). Freeware-Programm jMD zur Molekulardynamik-Simulation idealer Gase in dreidimensionaler Echtzeitbewegung. http://home.fhtw-berlin.de/~djoensso/jMD_HTML/mo-1a.html#anfang (25.09.2016)