

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 Dichteprofiles	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 Dichteprofiles	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: <code>main.f</code>	162
B.1.2	Leseroutinen	162
B.1.3	Ausgaberroutinen	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 <code>atomc.inc</code>	183
B.2.2	Atom-Parameter <code>atomp.inc</code>	183
B.2.3	<code>boxpp.inc</code>	183
B.2.4	<code>const.inc</code>	184
B.2.5	<code>cvtp.p.inc</code>	184
B.2.6	<code>dmmpp.inc</code>	184
B.2.7	<code>energ.inc</code>	185
B.2.8	<code>filep.inc</code>	185
B.2.9	<code>timep.inc</code>	185
B.2.10	<code>connp.inc</code>	185
B.3	Die Eingabedatei <code>.3d</code>	186
B.4	Die Ausgabedateien	196
B.4.1	Das Koordinatenfile <code>.xyz</code>	196
B.4.2	Das Geschwindigkeitsfile <code>.vel</code>	197
B.4.3	Das Beschleunigungsfile <code>.acc</code>	197
B.4.4	Das Restartfile <code>.rst</code>	197
B.4.5	Das Ausgabefile für Durchschnittsgrößen <code>.ave</code>	197
B.4.6	Die Clustergrößenstatistik <code>.csi</code>	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