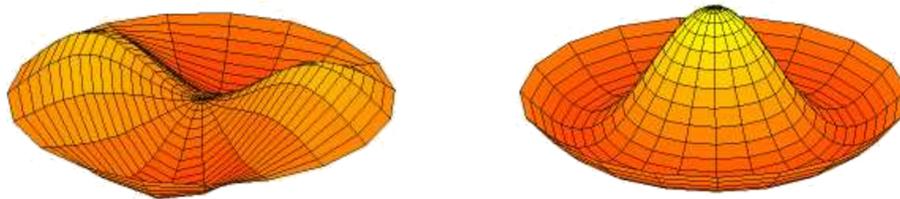


Computersimulation spezieller Moden von Nanomembranen



Bachelorarbeit
Ananta Nova Kälberer

15.05.2014

Fachbereich Physik
Universität Konstanz

Titelbild: Ausgelenkte Membranen[7].

Referent/in: Prof. Dr. Peter Nielaba

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Grundlagen	6
2.1	Molekulardynamik	6
2.2	Verlet-Integration	6
2.3	Stillinger-Weber-Potential	8
2.4	Besselfunktionen	10
2.5	Höhere Schwingungsmoden	11
2.5.1	Radialsymmetrische Moden	11
2.5.2	Allgemeiner Fall	13
2.6	Langevin Thermostat	14
3	Simulation	16
3.1	SEEVN	16
3.2	LAMMPS	17
4	Auswertung	22
4.1	Frequenzen	22
4.1.1	Schwingungsform	23
4.1.2	Kleine Membran	23
4.1.3	Große Membran	27
4.1.4	Dünne Membran	30
4.1.5	Vergleich Theorie	34
4.1.6	Heizen	36
4.2	Dämpfung	39
4.3	Modentransfer	41
5	Zusammenfassung	44

Abbildungsverzeichnis

1	Abhängigkeit des Paaranteils vom Abstand [1]	9
2	Einheitszelle von Silizium	16
3	v.l. kleine Membran, große Membran, dünne Membran	17
4	Die untersuchten Moden	18
5	Bereiche auf der Membran	19
6	Richtungen der angelegten Kräfte. \uparrow aus der Bildebene hinaus, \downarrow in die Bildebene hinein	20
7	Netz von Punkten auf der Membran	22
8	Vergleich der Schwingungsform von Theorie (Bessel) und Simu- lierter Kurve	24
9	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,1)$ der kleinen Membran	24
10	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,1)$ der kleinen Membran	25
11	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(2,1)$ der kleinen Membran	26
12	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,2)$ der kleinen Membran	27
13	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,1)$ der großen Membran	28
14	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,1)$ der großen Membran	28
15	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(2,1)$ der großen Membran	29
16	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,2)$ der großen Membran	30
17	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,2)$ der großen Membran	31
18	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,1)$ der dünnen Membran	32
19	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,1)$ der dünnen Membran	32
20	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(2,1)$ der dünnen Membran	33
21	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,2)$ der dünnen Membran	34
22	Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,2)$ der dünnen Membran	35
23	Logarithmisch aufgetragener Plot des Frequenzspektrums der klei- nen Membran bei 300K, keine Auslenkung	37
24	Logarithmisch aufgetragener Plot des Frequenzspektrums der großen Membran bei 300K, keine Auslenkung	37
25	Logarithmisch aufgetragener Plot des Frequenzspektrums der dün- nen Membran bei 300K, keine Auslenkung	38

26	Exponentialfit an die Schwingungsverläufe der kleinen Membran bei Auslenkung in Mode $u(1,2)$	39
27	Exponentialfit an die Schwingungsverläufe der großen Membran bei Auslenkung in Mode $u(0,1)$ (links) und Mode $u(1,1)$ (rechts)	40
28	Exponentialfit an die Schwingungsverläufe der dünnen Membran bei Auslenkung in Mode $u(1,2)$ (links) und Mode $u(0,2)$ (rechts)	40
29	Exponentialfit an die Schwingungsverläufe der kleinen Membran bei Auslenkung in Mode $u(0,2)$ und rechts bei Auslenkung der dünnen Membran in Mode $u(1,1)$	41
30	Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der kleinen Membran (0 & 90 Grad) in Angstrom.	42
31	Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der kleinen Membran (45 & 135 Grad) in Angstrom.	42
32	Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der großen Membran (180 & 270 Grad) in Angstrom.	43
33	Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der großen Membran (135 & 225 Grad) in Angstrom	43
34	Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der großen Membran (0 & 90 Grad) in Angstrom.	44

1 Einleitung

Die Nanotechnologie behandelt Strukturen, die sich, wie der Name schon sagt, in der Größenordnung von einigen Nanometern befinden.

Ein sehr interessantes Gebiet stellen dabei die Nanoresonatoren wie beispielsweise Nanobrücken und Nanomembranen dar. In dieser Arbeit werden spezielle höhere Schwingungsmoden von Nanomembranen angeregt und im Anschluss frei schwingen gelassen um deren Verhalten über einen bestimmten Zeitraum zu beobachten. Untersucht werden hier vor allen Dingen die Frequenzen, deren Abhängigkeiten, die Dämpfung und das während der Arbeit aufgetretene Phänomen des Modentransfers.

Im Abschnitt 2 werden die theoretischen Grundlagen der Molakulardynamik und Membranschwingungen beschrieben. Kapitel 3 behandelt die vorbereitenden Schritte, die notwendig sind um die Computersimulationen zu starten und gibt die Rahmenbedingungen wieder, unter denen die Simulationen ablaufen. Des weiteren werden die Moden, die angeregt werden, erläutert.

Der Auswertungsteil, Abschnitt 4, befasst sich zum einen mit den Moden und der Übereinstimmung mit der Theorie sowie mit den beobachteten Frequenzspektren der angeregten Moden die mittels Fouriertransformation ermittelt werden. Des weiteren werden die Dämpfungskoeffizienten ermittelt.

Darüberhinaus wird die Schwingung der Mode $u(1, 1)$ noch genauer untersucht, da hier ein "Modentransfer" stattfindet.

2 Grundlagen

2.1 Molekulardynamik

Molekulardynamische Computersimulationen stellen einen wichtigen Beitrag zur Berechnung und Visualisierung der Dynamik atomarer Systeme dar. Hier wird die zeitliche Entwicklung von nanomechanischen Systemen unter vorgegebenen Bedingungen simuliert.

In der Molekulardynamik werden die Newtonschen Bewegungsgleichungen numerisch gelöst. Da es fast unmöglich ist für eine solche Anzahl an Atomen Rechnungen per Hand zu erstellen und zu lösen, geschieht dies über spezielle Berechnungsverfahren, die im weiteren erläutert werden.

Newtonsche Bewegungsgleichungen: Mithilfe der Newtonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\vec{p}}_i = \vec{F}_i \quad (1)$$

$$m_i \dot{\vec{r}}_i = \vec{p}_i \quad (2)$$

m_i = Masse des i-ten Teilchens

\vec{p}_i = Impuls des i-ten Teilchens

\vec{F}_i = Kraft, die auf das i-te Teilchen wirkt,

und einem gegebenen Potential $V(r_1, \dots, r_N)$ kann man die Bewegung eines N-Teilchen Systems berechnen, indem man die Bewegungsgleichung für jedes Teilchen löst. Die Kraft erhält man hierbei aus dem gegebenen Potential V :

$$\vec{F}_i = -\nabla_i V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

Die Newtonschen Bewegungsgleichungen sind unter gegebenen Anfangsbedingungen numerisch eindeutig lösbar.

2.2 Verlet-Integration

Die Verlet-Integration ist ein Algorithmus zur numerischen Lösung von Bewegungsgleichungen molekulardynamischer Systeme. Da die potentielle Energie eine Funktion aller Atompositionen ($3N$) ist, kommt eine analytische Lösung nicht in Betracht. Stattdessen werden die Bewegungsgleichungen numerisch gelöst. Numerische Integrationsverfahren sind z.B. der Verlet-Algorithmus, Velocity-Verlet-Algorithmus und das Leap-Frog-Verfahren.

Verlet-Algorithmus Für die Herleitung des Verlet-Algorithmus [10] wird die Teilchenkoordinate \vec{r}_i mithilfe der Taylorentwicklung für die Zeitpunkte $r(t+\Delta t)$ und $r(t-\Delta t)$ genähert:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{F(t)}{2m}\Delta t^2 + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3}{dt^3} r + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (3)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{F(t)}{2m}\Delta t^2 - \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{d^3}{dt^3}r + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (4)$$

$r(t)$ = Teilchenkoordinate

$v(t)$ = Geschwindigkeit des Teilchens

$F(t)$ = wirkende Kraft

Durch Addition der beiden Gleichungen sowie der Vernachlässigung der $\mathcal{O}(\Delta t^4)$ Terme erhalten wir den Verlet-Algorithmus:

$$r(t + \Delta t) \approx 2r(t) - r(t - \Delta t) + \frac{F(t)}{m}\Delta t^2 \quad (5)$$

Anhand dieser Formel ist es möglich, bei gegebener Kraft $F(t)$ die Positionen der Teilchen zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ mit einem Fehler der Größenordnung Δt^4 zu bestimmen. Hierbei gilt, je kleiner Δt gewählt wird, desto höher die Rechengenauigkeit.

Die Geschwindigkeiten der einzelnen Teilchen ergeben sich aus:

$$r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t) = 2v(t)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (6)$$

$$\Rightarrow v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (7)$$

Diese Observable kann nun verwendet werden um beispielsweise die kinetische Energie zu berechnen. Für die hier durchgeführten Simulationen wird allerdings der Velocity-Verlet-Algorithmus verwendet, der eine Variation des Verlet-Algorithmus darstellt.

Velocity-Verlet-Algorithmus Die Formeln für den Velocity-Verlet-Algorithmus [10] lauten:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m}\Delta t^2 \quad (8)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{f(t + \Delta t) + f(t)}{2m}\Delta t \quad (9)$$

Hierbei werden zuerst die einzelnen Positionen mithilfe der Velocity-Verlet-Formel (8) für den Ort berechnet. Als nächsten Schritt erhält man über das gegebene Potential die Kraft F , woraus dann die Geschwindigkeiten anhand der Velocity-Verlet-Gleichung (8) berechnet werden. Da bei dem Velocity-Verlet-Algorithmus die Energie erhalten bleibt, eignet er sich sehr gut für Berechnungen in molekulardynamischen Systemen.

2.3 Stillinger-Weber-Potential

In dieser Arbeit werden Silizium-Membranen behandelt, für die das Stillinger-Weber-Potential [4] benutzt wird, da es abgesehen von der Paarwechselwirkung auch einen Dreikörperanteil berücksichtigt. Quantenmechanische Effekte werden bei diesem, wie bei allen klassischen Potentialen, vernachlässigt. Das Stillinger-Weber-Potential weist dazu ein gutes Verhältnis der Genauigkeit gegenüber dem Rechenaufwand auf. Dieses Potential wurde für Diamantstrukturen, vor allen Dingen Silizium konzipiert, um eine tetraedrische Basis zu begünstigen. Das Stillinger-Weber-Potential sieht wie folgt aus:

$$\Phi = \sum_{i,j} \phi_2(r_{ij}) + \sum_{i,j,k} \phi_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) \quad (10)$$

Hierbei gilt: $i < j < k$

Es wird nun noch eine Energie ϵ und eine Längeneinheit σ so gewählt, dass v_2 eine Tiefe von -1 besitzt und $v_2'(2^{\frac{1}{6}}) = 0$ ist (vgl. Abb. 1). Man kann nun schreiben:

$$\phi_2(r_{ij}) = \epsilon \cdot v_2\left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right) \quad (11)$$

$$\phi_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = \epsilon \cdot v_3\left(\frac{\vec{r}_i}{\sigma}, \frac{\vec{r}_j}{\sigma}, \frac{\vec{r}_k}{\sigma}\right) \quad (12)$$

Wobei $v_2(r_{ij})$ der Paaranteil ist. Für diesen gilt:

$$v_2(r) = \begin{cases} A(Br^{-p} - r^{-q}) \exp\left(\frac{1}{r-a}\right) & r < a \\ 0 & r \geq a \end{cases} \quad (13)$$

Dieses Paarpotential ist bei $r = a$ stetig.

Der richtige Bindungswinkel stabilisiert die Zelle. Die drei Terme des Dreikörperanteils setzen sich aus der Permutation des Indextripel von 3 benachbarten Teilchen zusammen und werden von den Abständen sowie dem Bindungswinkel bestimmt.

$$v_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = h(r_{ij}, r_{ik}, \psi_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \psi_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \psi_{ikj}) \quad (14)$$

ψ_{jik} = Bindungswinkel zwischen \vec{r}_j und \vec{r}_k des i-ten Teilchens.

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \psi_{jik}) = \begin{cases} \lambda \cdot \exp\left(\frac{\gamma}{r_{ij}-a} + \frac{\gamma}{r_{ik}-a}\right) \cdot \left(\cos\psi_{jik} + \frac{1}{3}\right)^2 & r < a \\ 0 & r \geq a \end{cases} \quad (15)$$

h wird minimal beim Tetraederwinkel $109,47^\circ$ und stabilisiert so die Diamantstruktur.

Um die molekulardynamische Computersimulation numerisch auszuführen wird die Kraft benötigt. Diese besteht aus einem Paaranteil $\vec{f}_{i,2}$ und dem Dreikörperanteil $\vec{f}_{i,3}$:

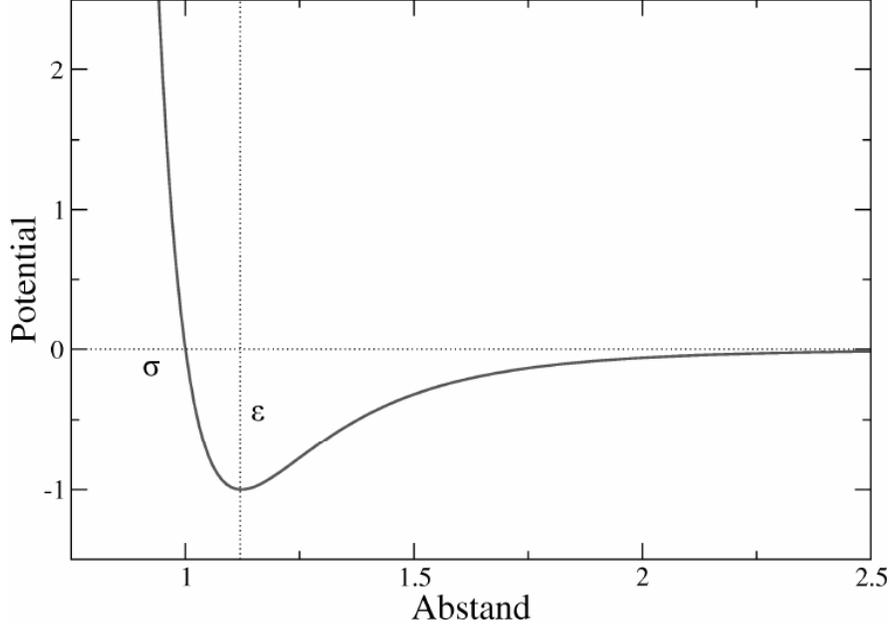


Abbildung 1: Abhängigkeit des Paaranteils vom Abstand [1]

$$\vec{F}_i = \vec{f}_{i,2} + \vec{f}_{i,3}, \quad (16)$$

wobei (folgende Ableitung orientiert sich an der Darstellung in [1])

$$\begin{aligned} \vec{f}_{i,2} &= \phi_2 \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \left(\frac{p \cdot B \cdot r_{ij}^{-p-1} - q \cdot r_{ij}^{-q-1}}{B \cdot r_{ij}^{-p} - r_{ij}^{-q}} + (r_{ij} - a)^{-2} \right) \\ \vec{f}_{i,3} &= -\gamma h_{jik} \left(\frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} (r_{ij} - a)^{-2} + \frac{\vec{r}_{ik}}{r_{ik}} (r_{ik} - a)^{-2} \right) \\ &+ 2 \cdot \lambda \cdot \exp \left(\frac{\gamma}{r_{ij} - a} + \frac{\gamma}{r_{ik} - a} \right) \cdot \left(\cos \psi_{jik} + \frac{1}{3} \right) \\ &\cdot \left(\frac{r_{ij}}{r_{ij} r_{ik}} + \frac{r_{ik}}{r_{ik} r_{ij}} - \left(\frac{r_{ij}}{r_{ij} r_{ik}} + \frac{r_{ik}}{r_{ik} r_{ij}} \right) \cos \psi_{jik} \right) \\ &- \gamma h_{ijk} \left(\frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} (r_{ij} - a)^{-2} \right) + 2 \lambda \exp \left(\frac{\gamma}{r_{ij} - a} + \frac{\gamma}{r_{jk} - a} \right) \\ &\cdot \left(\cos \psi_{ijk} + \frac{1}{3} \right) \cdot \left(\frac{r_{jk}}{r_{jk} r_{ij}} + \frac{r_{ij}}{r_{ij}^2} \cos \psi_{ijk} \right) - \gamma h_{ikj} \left(\frac{\vec{r}_{ik}}{r_{ik}} (r_{ik} - a)^2 \right) \end{aligned} \quad (17)$$

$$+2\lambda \cdot \exp\left(\frac{\gamma}{r_{ik} - a} + \frac{\gamma}{r_{jk} - a}\right) \cdot \left(\cos\psi_{ikj} + \frac{1}{3}\right) \cdot \left(-\frac{r_{jk}}{r_{jk}r_{ik}} + \frac{r_{ik}}{r_{ik}^2} \cos\psi_{ikj}\right) \quad (18)$$

Für Silizium lauten die Parameter:

$$A = 7,049556277$$

$$B = 0,67022245584$$

$$p = 4$$

$$q = 0$$

$$a = 1,8$$

$$\lambda = 21$$

$$\gamma = 1,2$$

2.4 Besselfunktionen

Da im Folgenden kreisförmige Membranen untersucht werden, ist die Kenntnis der Besselschen Differentialgleichung wichtig. Die Besselsche Differentialgleichung beschreibt den radialen Verlauf einer Welle einer kreisförmigen Membran bzw. bei zylindrischer Symmetrie. Sie ist eine lineare gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung und wird beschrieben durch:

$$x^2 \cdot \frac{d^2 f}{dx^2} + x \cdot \frac{df}{dx} + (x^2 - v^2) f = 0 \quad (19)$$

v = reelle o. komplexe Zahl.

Die Lösungen der Differentialgleichung werden Besselfunktionen v -ter Ordnung genannt. Da es zwei linear unabhängige Lösungen der Differentialgleichung gibt, existieren unterschiedliche Varianten der Besselfunktionen. Hier wird allerdings nur die Besselfunktion erster Gattung erläutert, da die weiteren hier nicht von Bedeutung sind.

Bessel-Funktionen 1. Gattung J_v Die Besselsche Differentialgleichung wird gelöst durch die Besselfunktion erster Gattung, die wie folgt definiert ist:

$$J_v(x) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r \left(\frac{x}{2}\right)^{2r+v}}{\Gamma(v+r+1)r!} \quad (20)$$

$\Gamma(x)$ =Gammafunktion

v =Ordnung

Für $x = 0$ wird die Funktion für ganzzahlige v endlich und für nicht ganzzahlige v ergeben sich die linear unabhängigen Lösungen J_v sowie J_{-v} . Darüber hinaus gilt: $J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x) = J_n(-x)$ für $n \in \mathbb{Z}$. Die weitere unabhängige Lösung ist die Bessel-Funktion 2. Gattung, auf die hier aber nicht näher eingegangen wird.

Da das verwendete Simulationsprogramm aus Abschnitt 2 diese Formel allerdings nicht einlesen kann, wird für die Simulation folgende Näherung verwendet [6]:

$$J_0 \approx \frac{1}{4} \left[1 + \cos(x) + 2\cos\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right) \right] \quad (21)$$

Der Fehler für diese Näherung ist für $x < 3,6$ kleiner als 1%. Für $x < 4,5$ beträgt der Fehler $< 5\%$.

2.5 Höhere Schwingungsmoden

Es gibt praktisch unendlich viele Möglichkeiten wie eine kreisrunde Membran schwingen kann, abhängig von beispielsweise Größe, Dicke, Anregung. Die einfachen Schwingungsmoden zu finden ist dabei nicht schwer. Jedoch kann jede komplexe Schwingung in eine Reihe einfacher Schwingungen zerlegt werden und als Überlagerung dieser veranschaulicht werden.

Wenn nun eine offene Scheibe Ω mit Radius a angenommen wird mit der Auslenkung $u(x, y, t)$ am Punkt (x, y) , sowie dem Rand $\partial\Omega$ erhalten wir für die Schwingung der Membran die Wellengleichung ohne Randbedingungen:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (22)$$

Diese Gleichung gilt für $(x, y) \in \Omega$ und $u = 0$ auf $\partial\Omega$.

Da es sich hier um eine Kreisscheibe handelt, ist es sinnvoll Zylinderkoordinaten (r, θ, z) zu verwenden, was zur folgenden Gleichung führt:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \right) \quad (23)$$

Gilt für $0 \leq r \leq a$ sowie $0 \leq \theta \leq 2\pi$. u wird 0 für $r = a$. c ist die Schallgeschwindigkeit in der Membran.

2.5.1 Radialsymmetrische Moden

Zuerst werden hier die radialsymmetrischen Moden vorgestellt, da diese nicht vom Winkel θ abhängen. Dann folgt für die Wellengleichung [7] :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right) \quad (24)$$

Nun wird u in die zwei Teile $R(r)$ und $T(t)$ zerlegt:

$$u(r, t) = R(r)T(t) \quad (25)$$

Nach Einsetzen von $u(r, t) = R(r)T(t)$ in die Gleichung (25) und Umstellen erhält man:

$$\frac{T''(t)}{c^2 T(t)} = \frac{1}{R(r)} \left(R''(r) + \frac{1}{r} R'(r) \right) \quad (26)$$

Da weder die linke Seite von r noch die rechte Seite von t abhängt, können beide gleich einer Konstanten gesetzt werden

$$T'' = Kc^2T(t) \quad (27)$$

$$rR''(r) + R'(r) - KrR(r) = 0 \quad (28)$$

Da für die Gleichung von T nur für $K < 0$ eine oszillierende Wellenfunktion zu erwarten ist, wird $K = -\lambda^2$ verwendet. Für $T(t)$ wird nun als Ansatz verwendet:

$$T(t) = A\cos(c\lambda t) + B\sin(c\lambda t) \quad (29)$$

In Abschnitt 1.4 wurden die Besselfunktionen als Lösungen für radialsymmetrische Wellen beschrieben. Da $K = -\lambda^2$, findet man heraus, dass die Lösungen für die Differentialgleichung von R Linearkombinationen von Besselfunktionen vom Grade 0 sind.

$$R(r) = c_1J_0(\lambda r) + c_2Y_0(\lambda r) \quad (30)$$

Wobei die Funktion Y_0 nicht beschränkt ist für $r \rightarrow 0$. Da dies aber physikalisch sinnfrei ist, muss die Konstante $c_2 = 0$ sein. Zusätzlich wird $c_1 = 1$ gesetzt.

$$\Rightarrow R(r) = J_0(\lambda r) \quad (31)$$

Am Rand wird die Membran festgehalten, weswegen die Auslenkung u dort Null betragen muss.

$$R(a) = J_0(\lambda a) = 0 \quad (32)$$

Die Besselfunktion besitzt eine unendliche Anzahl von Nullstellen

$$0 < \alpha_{01} < \alpha_{02} < \dots$$

$$\Rightarrow \lambda a = \alpha_{0n} \quad (33)$$

für $n = 1, 2, 3, \dots$

Eingesetzt ergibt dies:

$$R(r) = J_0\left(\frac{\alpha_{0n}}{a}r\right) \quad (34)$$

Wenn nun alles zusammengesetzt wird, erhält man für die radialsymmetrischen Lösungen für u :

$$u_{0n}(r, t) = (A \cdot \cos c\lambda_{0n}t + B \cdot \sin c\lambda_{0n}t) \cdot J_0(\lambda_{0n}r) \quad (35)$$

für $n = 1, 2, 3, \dots$

2.5.2 Allgemeiner Fall

Im allgemeinen Fall kann die Winkelabhängigkeit nicht, wie bei den radialsymmetrischen Wellenfunktionen [7], weggelassen werden. Wie in Teil 1.5.1 wird auch hier ein Separationsansatz gemacht:

$$u(r, \theta, t) = R(r)\Theta(\theta)T(t) \quad (36)$$

Einsetzen in die Wellengleichung ergibt:

$$\frac{T''(t)}{c^2 T(t)} = \frac{R''(r)}{R(r)} + \frac{R'(r)}{rR(r)} + \frac{\Theta''(\theta)}{r^2 \Theta(\theta)} = K \quad (37)$$

Auch hier wird wieder $K = -\lambda^2$ verwendet, wobei $\lambda > 0$ ist. Analog zur radialsymmetrischen Lösung erhält man:

$$\Rightarrow T(t) = A \cdot \cos(c\lambda t) + B \cdot \sin(c\lambda t) \quad (38)$$

Für R und Θ ergibt sich:

$$\frac{R''(r)}{R(r)} + \frac{R'(r)}{rR(r)} + \frac{\Theta''(\theta)}{r^2 \Theta(\theta)} = -\lambda^2 \quad (39)$$

Durch Variablentrennung erhält man:

$$\lambda^2 r^2 + \frac{r^2 R''(r)}{R(r)} + \frac{r R'(r)}{R(r)} = -\frac{\Theta''(\theta)}{\Theta(\theta)} = L \quad (40)$$

Θ ist 2π -periodisch in der Variablen θ . Mit dieser Kenntnis wird folgender Ansatz gemacht:

$$\Theta(\theta) = C \cdot \cos(m\theta) + D \cdot \sin(m\theta) \quad (41)$$

wobei $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ und C, D Konstanten sind.

Für die Lösung von R gilt analog zur radialsymmetrischen Lösung:

$$R(r) = J_m(\lambda_{mn} r) \quad (42)$$

mit $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ $n = 1, 2, 3, \dots$ und $\lambda_{mn} = \frac{\alpha_{mn}}{a}$, wobei α_{mn} die n -te Nullstelle von J_m ist.

Wenn nun $u(r, \theta, t) = R(r)\Theta(\theta)T(t)$ zusammengefügt wird erhält man als Lösung für die Differentialgleichung zweiten Grades:

$$u_{mn}(r, \theta, t) = (A \cdot \cos(c\lambda_{mn} t) + B \cdot \sin(c\lambda_{mn} t)) \cdot J_m(\lambda_{mn} r) \cdot (C \cdot \cos(m\theta) + D \cdot \sin(m\theta)) \quad (43)$$

für $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ und $n = 1, 2, 3, \dots$

Im weiteren wird auch die Notation $u(m, n) := u_{mn}$ verwendet.

2.6 Langevin Thermostat

Der Langevin Thermostat wird verwendet um die Membran auf 300K zu heizen. Er wird verwendet, da er den Vorteil hat, dass kurzzeitige Temperaturschwankungen erlaubt sind wie man es auch in der Realität wiederfindet. Dies hat seine Ursache darin, dass er nicht auf Reskalierung der Geschwindigkeiten bzw. Impulsen beruht, sondern eine zusätzliche Kraft wirkt.

Man kann sich das Modell so vorstellen, dass sich große Partikel in einer Umgebung von vielen kleinen Partikeln bewegen. Die kleinen Partikel besitzen dabei die gewünschte Temperatur. Aus dieser Bewegung erhält man eine Dämpfung wie auch eine Impulsänderung, welche durch zufällige Stöße hervorgerufen wird. Daraus ergibt sich dann in Formeln:

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{f}(r, t) - \alpha\dot{\vec{r}} + \beta(t) \quad (44)$$

$-\alpha\dot{\vec{r}}$ = Dämpfung

$\beta(t)$ = durch Stöße verursachte Kraft

[12]

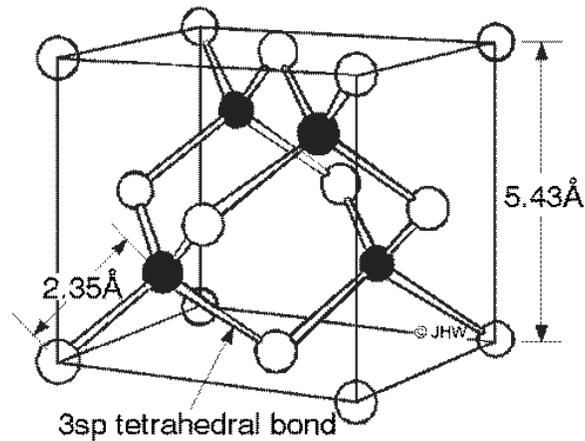


Abbildung 2: Einheitszelle von Silizium

3 Simulation

In diesem Teil werden die einzelnen Simulationsschritte erläutert sowie die verwendeten Programme vorgestellt.

3.1 SEEVN

Der Name SEEVN steht für Simulation elastischer Eigenschaften von Nanostrukturen. Das Programm wurde von Kristian Scholz geschrieben und ist ein in Fortran 95 implementierter, molekulardynamischer Programmcode [1]. Er wurde ursprünglich für die Computersimulation von Nanostrukturen verfasst und wird hier für die Strukturierung von Membranen verwendet.

SEEVN beinhaltet Algorithmen wie den Verlet- und Velocity-Verlet-Integrator, den Andersen- sowie der Nosé-Hoover-Thermostat, das Lennard-Jones-Potential wie auch das Stillinger-Weber-Potential, Methoden zur Erzeugung von Startkonfigurationen, Berechnung verschiedener Systemgrößen und Nachbarschaftslisten und einen Mechanismus, der es erlaubt, die Simulation in einzelne Simulationsschritte aufzugliedern mithilfe von Zwischenständen.

Bevor mit der Simulation begonnen wird, muss das zu untersuchende System festgelegt werden. Hierfür werden die Orte sowie Geschwindigkeiten zum Zeitpunkt $t=0$ festgelegt. Die Startkonfiguration kann von SEEVN erzeugt werden. Dazu muss die Einheitszelle definiert werden, welche dann beliebig oft aneinander gereiht wird.

In dieser Arbeit wird für die Computersimulation der Membranen Silizium verwendet. Silizium besitzt Diamantstruktur und ist in Abbildung 2 dargestellt. Nachdem mit dem Programm SEEVN eine Struktur aufgesetzt wurde, kann diese für Simulationen verwendet werden. In diesem Fall wurden mit SEEVN zuerst 4-eckige Silizium-Membrane erzeugt mit verschiedenen Ausdehnungen.

Membran	Klein	Groß	Dünn
Ausdehnung (in Einheitszellen)	2x20x20	2x40x40	1x40x40
Anzahl Atome	3619	20357	11320

Tabelle 1: Eckdaten der Membranen

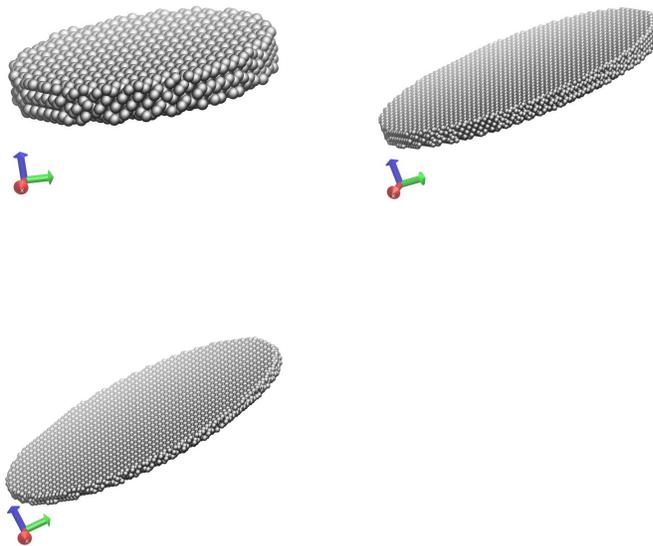


Abbildung 3: v.l. kleine Membran, große Membran, dünne Membran

Die Ausdehnungen betragen 2x20x20, 2x40x40 und 1x40x40 (in Einheitszellen). Die Anzahl der Atome in den Membranen können in Tabelle 1 abgelesen werden:

3.2 LAMMPS

LAMMPS ist ein Programm, mit dem molekulardynamische Systeme modelliert und Simulationen durchgeführt werden können[9]. Da hier runde Membranen untersucht werden, werden aus den quadratischen, mit SEEVN erzeugten Membranen, Zylinder mit den Radien 9 und 20 ausgeschnitten. Da die Membranen allerdings an den Seiten befestigt sein sollen wird ein Rand mit der Breite einer Einheitszelle festgehalten. Somit besitzt der schwingende Teil der Membranen nur einen Radius von 8 bzw. 19 Einheitszellen. Der Mittelpunkt der Kreismembranen liegt dabei im Ursprung und die Kreisscheibe erstreckt sich über die x-y Ebene.

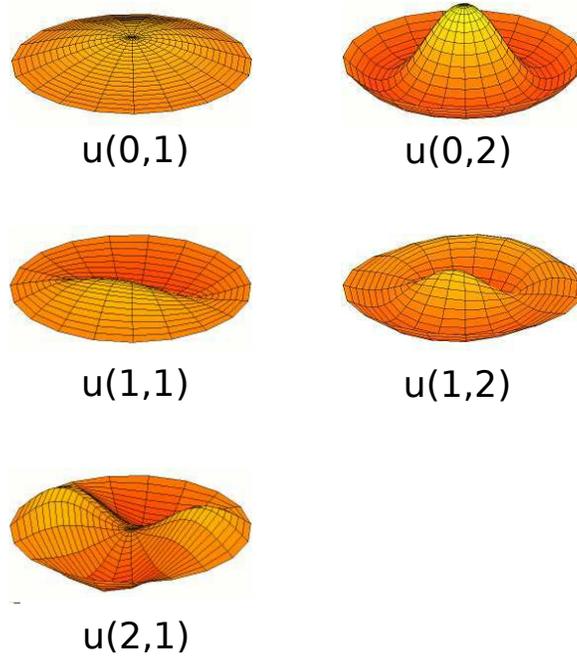


Abbildung 4: Die untersuchten Moden

Nachdem Struktur und Form der Membranen festgelegt wurden, wird die Membran auf nahezu $0K$ heruntergekühlt. Dies geschieht mit der Temp/Rescale Funktion. Dabei handelt es sich um eine Geschwindigkeitsreskalierungsfunktion. Die Reskalierungsfunktion nutzt aus, dass die Temperatur proportional zur kinetischen Energie ist, welche wiederum von den Teilchengeschwindigkeiten abhängt. Hierbei werden die Geschwindigkeiten von 10% zufällig ausgewählter Teilchen in jedem zweiten Zeitschritt auf Null gesetzt. Da die normale Zeitintegration trotzdem durchgeführt wird, kann dadurch das System langsam in seinen Grundzustand übergehen ohne "einzufrieren". Es wird hier jeweils 100000 Zeitschritte lang gekühlt und weitere 100000 Schritte ohne Kühlung durchgeführt zur Überprüfung ob das System stabil in der Temperatur verharrt.

Für eine weitere Simulationsserie werden die Membranen mit einem Langevin-Thermostat erhitzt um zu untersuchen wie sich die Systeme bei Raumtemperatur ($300K$) verhalten bzw. welche Moden bereits thermisch angeregt sind.

Schwingung Nachdem alle vorbereitenden Schritte (Aufsetzen der Struktur, Definition der Ausdehnung der Membranen, Kühlung) ausgeführt wurden, wird die Membran ausgelenkt. Dazu muss zuerst überlegt werden welche Schwingungsmoden untersucht werden sollen. Hier wurden die Moden u_{01} , u_{02} , u_{11} , u_{12} und u_{21} analysiert wie in Abbildung 4 zu sehen ist.

Zum Auslenken der Moden u_{01} , u_{11} , u_{12} und u_{21} werden homogene Kraftfelder

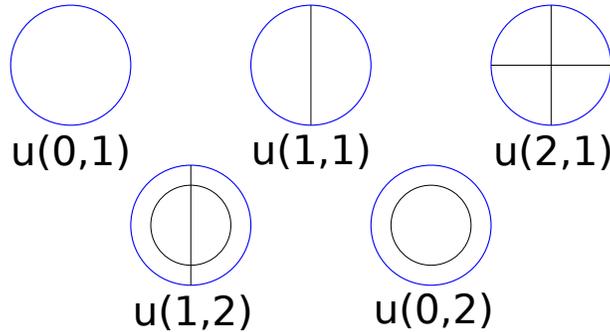


Abbildung 5: Bereiche auf der Membran

auf verschiedene, definierte Bereiche auf der Membran angelegt. Zum Anregen der Mode u_{02} wird eine Näherung für die Besselfunktion auf die Membran angelegt.

Da allerdings nicht die angeregte sondern die freie Schwingung von Interesse ist, wird die Membran zuerst mit einer oder mehreren definierten Kräften ausgelenkt und dann losgelassen. Die Membranen schwingen im Anschluss 10.000.000 bis 50.000.000 Zeitschritte frei, wobei ein Zeitschritt 1 Femtosekunde entspricht.

Die interessantesten Observablen in dem schwingenden System sind die kinetische Energie, potentielle Energie, Gesamtenergie, Druck, Temperatur und als wichtigster Punkt, die Koordinaten der Schwingungsbäuche, Knoten und die verschiedenen Schwerpunkte des zu untersuchenden Systems (vgl. Abbildung 7). Da allerdings mit dem Schwerpunkt nicht alle Koordinaten einzeln erfasst werden, die wichtig sind, wurden unter anderem mehrere Bereiche auf der Membran definiert, von denen man am Ende der Simulation auch die Koordinaten der Bewegung erhält. Wirklich von Bedeutung ist hier allerdings nur die Auslenkung in z-Richtung, da die Atome zum einen nur in z-Richtung ausgelenkt werden und zum anderen die x- und y-Koordinaten sich kaum ändern.

Nachdem die Membranen auf 0K heruntergekühlt wurden mithilfe der Temp / Rescale-Funktion, werden diese im weiteren Schritt ausgelenkt. Hierzu müssen die einzelnen Moden betrachtet werden, um zu entscheiden welche Kräfte sinnvoll sind und wo diese angelegt werden sollen. Dafür werden zuerst die Bereiche auf der Membran definiert (Abb. 5), auf die später die Kräfte angelegt werden um die Membran auszulernen (Abb.6).

Wie bereits erwähnt werden für die Anregung der Moden u_{01} , u_{11} , u_{12} und u_{21} homogene Kraftfelder angelegt und für die Mode u_{02} eine Kraft mit Näherung der Besselfunktion eingefügt. Dazu müssen noch jeweils die Richtungen der Kraftfelder angegeben werden. Im Laufe der Arbeit wurden mehrere verschieden starke Kräfte ausgetestet.

Bei Abbildung 6 ist zu beachten, dass die Membranen von oben abgebildet sind, die Kräfte jeweils aber senkrecht zu der aufgezeichneten Ebene angelegt werden.

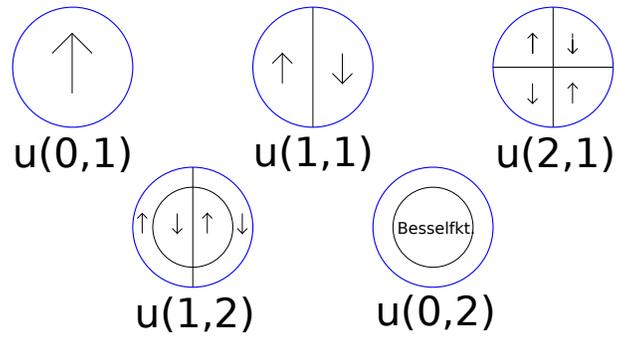


Abbildung 6: Richtungen der angelegten Kräfte. \uparrow aus der Bildebene hinaus, \downarrow in die Bildebene hinein

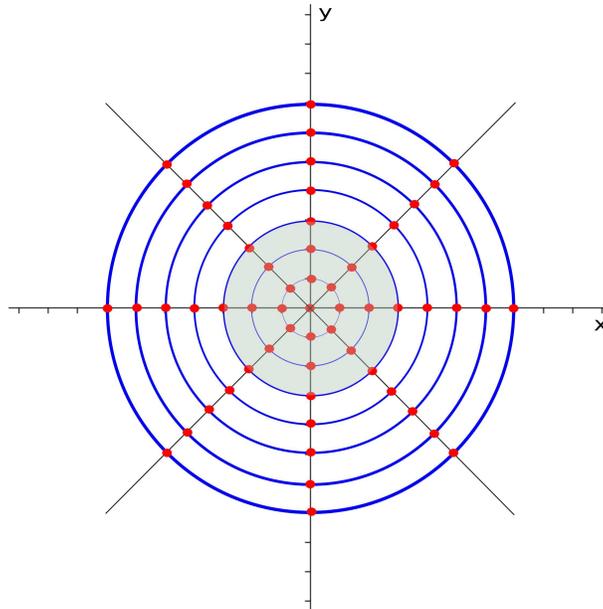


Abbildung 7: Netz von Punkten auf der Membran

4 Auswertung

4.1 Frequenzen

In diesem Auswertungsteil werden die Frequenzen der verschiedenen Schwingungsmoden und Membranen untersucht.

Hierzu wird zuerst ein Netz von kleinen Zylindern auf die Membran gelegt, damit so viele Schwingungsmoden wie möglich erfasst werden können. Das Netz ist in Abbildung 7 zu sehen.

Die Punkte sind kleine Regionen auf der Membran die sich mit dieser mitbewegen im Schwingungsfall. Die Schwerpunkte der Regionen werden mit der Zeit aufgezeichnet und können dann zur Auswertung verwendet werden. Der grau hinterlegte Teil in der Zeichnung kennzeichnet die kleine Membran. Da LAMMPS nur eine gewisse Kapazität von Regionen erlaubt, werden für die Auswertung nur bestimmte, sinnvolle Punkte ausgewählt. Für die kleine Membran sind alle drei Ringe erfasst, für die beiden großen Membranen werden in den meisten Fällen die Ringe 2, 5 und 7 (ab der Mitte) verwendet sowie der Mittelpunkt und die Schwerpunkte der relevanten Schwingungsregionen. Zwei aufeinander folgende Ringe haben jeweils einen Abstand von 2 Einheitszellen.

Die Schwingung der Koordinaten des Netzes werden über die Zeit aufgezeichnet. Diese Werte werden dann in Matlab eingelesen und Fouriertransformiert. Im Anschluss werden die Spektren aufsummiert. Als Plot erhält man nun das Frequenzspektrum der verschiedenen Membranen bei den oben genannten Aus-

lenkungen der bestimmten Schwingungsmoden.

Zum Vergleich werden die theoretischen Werte herbeigezogen. Diese werden berechnet über die die Formel

$$\omega = \lambda_{mn} \cdot c,$$

wobei hier c die Schallgeschwindigkeit in Silizium bei $0K$ ist. Die Schallgeschwindigkeiten werden über die Formel

$$c = \sqrt{\frac{E}{2 \cdot \rho \cdot (1 + \mu)}}$$

E =Elastizitätsmodul

ρ =Dichte

μ =Poissonzahl

ermittelt. Der Elastizitätsmodul von Silizium beträgt 131GPa und die Poissonzahl 0,22.

4.1.1 Schwingungsform

Zuerst wird überprüft ob die Schwingungsform für die Membran übereinstimmt. Hierzu wird die Theoriekurve (43) mit der Schwingungsform der Membran verglichen. Um den direkten Vergleich herzustellen wird die Theoriekurve auf die Größe der Membran angepasst und in Matlab geplottet. Um die Schwingung der simulierten Membran festzuhalten wurden 7 in einer Linie liegende Punkte gewählt, die sich auf der Membran befinden und die mit der Zeit schwingen. In Abbildung 8 ist die Schwingung für die Mode $u(1,1)$ zu einem festen Zeitpunkt T dargestellt. Es handelt sich hier um die räumliche Schwingung. Man kann erkennen, dass beide Kurven den gleichen Verlauf aufweisen und sehr nahe zusammen liegen.

4.1.2 Kleine Membran

Mode $u(0,1)$ Um die Mode $u(0,1)$ auszulenken wurde eine Kraft von $6,4 pN$ auf die Membran angelegt. Bei der maximalen Auslenkung wird die Membran losgelassen und schwingt dann frei über 10.000.000 Zeitschritte (Femtosekunden). Die Auslenkungen werden dann aufgezeichnet und mittels Fouriertransformation erhält man das Frequenzspektrum. Das logarithmisch aufgetragene Frequenzspektrum von $u(0,1)$ sieht man in Abbildung 8.

Als Plot wird hierbei der logarithmische gewählt, da in den meisten Fällen beim linearen Plot nur der Hauptpeak zu sehen war. Dies ist zwar gut, denn es soll im Idealfall stets nur eine Mode angeregt sein, aber es ist auch von Interesse welche weiteren Moden trotzdem angeregt sind. In Abbildung 9 sieht man, dass die Hauptmode eine Frequenz von $165,8 GHz$ besitzt. Weiterhin sind noch die folgenden Frequenzen angeregt: $318,6 GHz$, $305,4 GHz$, $497,4 GHz$, $510,1 GHz$. Wie im nächsten Paragraphen zu sehen ist, handelt es sich bei der Frequenz $305,4 GHz$ um die in $u(1,1)$ am stärksten vertretene Frequenz.

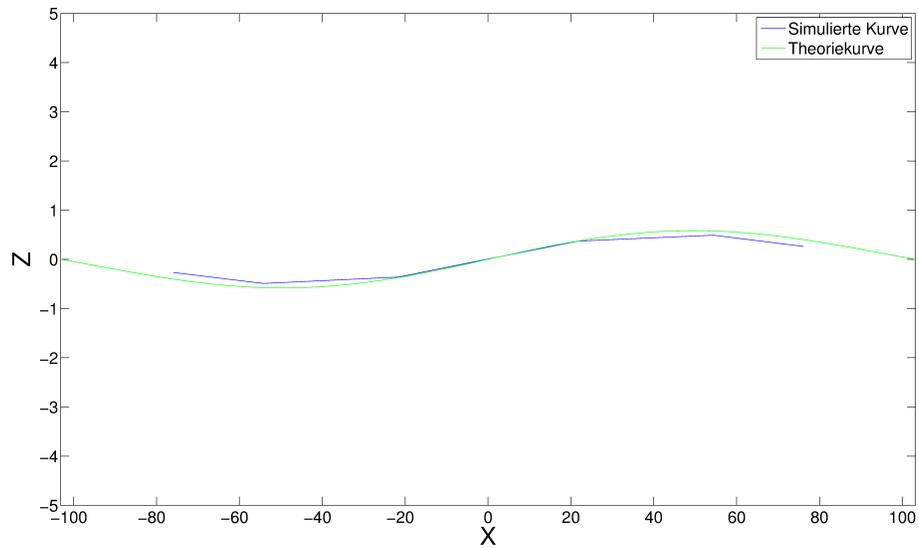


Abbildung 8: Vergleich der Schwingungsform von Theorie (Bessel) und Simulierter Kurve

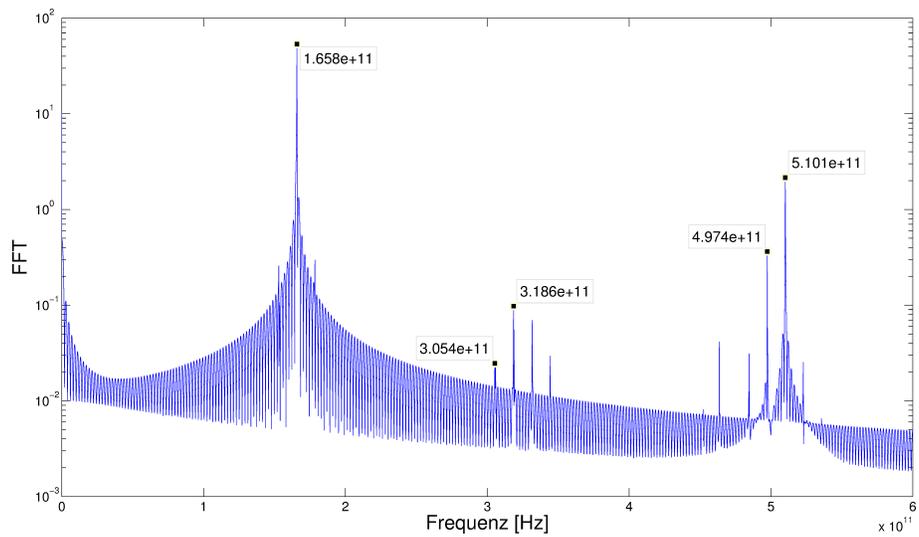


Abbildung 9: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,1)$ der kleinen Membran

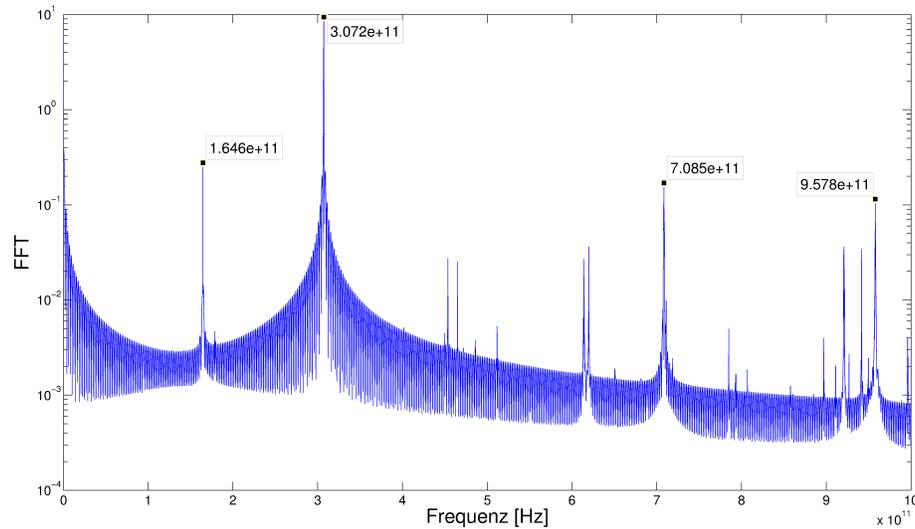


Abbildung 10: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,1)$ der kleinen Membran

Damit sieht man, dass nicht nur die Hauptmode angeregt wurde, sondern auch die Mode $u(1,1)$

Mode $u(1,1)$ Um die Mode $u(1,1)$ auszulenken wird, wie in Abbildung 6 zu sehen ist, jeweils auf die rechte und die linke Hälfte eine Kraft von $6,4 pN$ angelegt. Die Membran schwingt dann über eine Dauer von 50.000.000 Zeitschritten frei.

Auch in Abbildung 10 ist eigentlich nur der Peak bei $307,2 GHz$ wirklich dominant. Des Weiteren ist allerdings noch die Grundmode vorhanden mit dem Peak bei $164,6 GHz$ sowie ein paar höhere Moden mit den Frequenzen $708,5 GHz$ und $957,8 GHz$.

Mode $u(2,1)$ Zur Auslenkung der Mode $u(2,1)$ werden auf die 4 Teilgebiete jeweils die Kraft $4,8 pN$ angelegt, zwei nach oben, zwei nach unten. Die Membran schwingt über einen Zeitraum von 10.000.000 fs frei und besitzt folgende Frequenzen (siehe Abb. 11):

Der Hauptpeak nach Anregung von $u(2,1)$ befindet sich bei der Frequenz $466,3 GHz$. Dieses Frequenzspektrum enthält ebenfalls die Frequenzen $165,1 GHz$ und $307,8 GHz$. Wie man Abbildung 10 und 11 entnehmen kann, entsprechen diese Frequenzen den Hauptpeaks von $u(0,1)$, $u(1,1)$ und $u(0,2)$. Somit sieht man, dass nach Anregung ebenfalls die beiden Moden $u(0,1)$ und $u(1,1)$ vertreten sind.

Mode $u(1,2)$ Mode $u(1,2)$ wird bei der kleinen Membran nicht behandelt, da der Durchmesser zu klein ist, um die Regionen gegeneinander auszulenken.

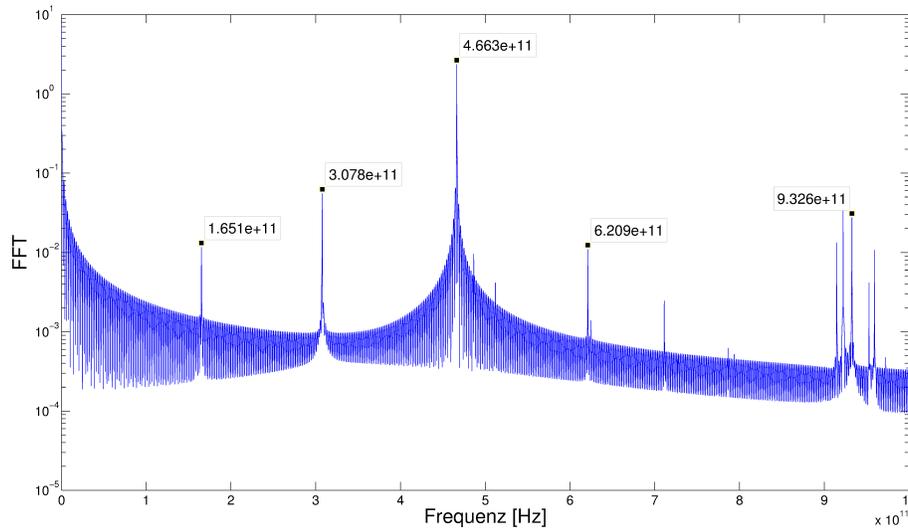


Abbildung 11: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(2,1)$ der kleinen Membran

Mode $u(0,2)$ Um die Mode $u(0,2)$ anzuregen wird keine konstante Kraft angelegt, sondern die Näherung für die Besselfunktion 0. Grades eingebunden, die wie folgt aussieht:

$$F(r) = 0,025 \cdot (0,25 \cdot (1 + \cos(r)) + 2 \cdot \cos(r/\sqrt{2})),$$

wobei r auf die richtige Membrangröße angepasst wird. Die Mode $u(0,2)$ schwingt nun über 20.000.000 Zeitschritte frei und das Frequenzspektrum ist in Abbildung 12 zu sehen:

In Abbildung 12 ist sehr deutlich der Peak bei $164,7 \text{ GHz}$ zu sehen. Hierbei handelt es sich um die Schwingungsfrequenz der Hauptmode $u(0,1)$. Als zweitstärkster Peak ist die Frequenz $509,1 \text{ GHz}$ vertreten. Wenn die Visualisierung in VMD betrachtet wird, wird schnell klar, woran dies liegt. Die Knotenlinie, die eigentlich in Ruhe sein sollte, schwingt mit der Frequenz von Mode $u(0,1)$ mit. Es ist also nicht gelungen die reine Schwingung der Mode $u(0,2)$, auch Sombrero-Mode genannt, anzuregen. Die Frequenz der Sombrero-Mode ist demnach $509,1 \text{ GHz}$. Diese Frequenz ist ebenfalls als zweiter Hauptpeak im Frequenzspektrum von $u(0,1)$ zu finden. Zum Teil ist auch die Mode $u(1,1)$ angeregt. Die Frequenz $306,9 \text{ GHz}$ findet man als Hauptpeak im Frequenzspektrum von $u(1,1)$ wieder. Des weiteren sind noch viele höhere Moden leicht angeregt. Hier muss allerdings erwähnt werden, dass es nicht sonderlich gut funktioniert, die relativ zu ihrem Durchmesser dicke Membran in die Sombrero-Form auszuformen und gleichmäßig schwingen zu lassen.

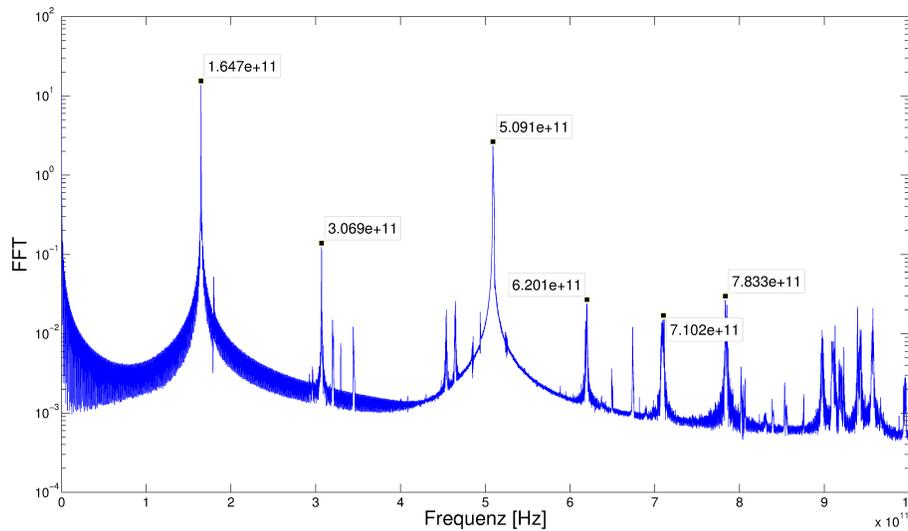


Abbildung 12: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,2)$ der kleinen Membran

4.1.3 Große Membran

Die große Membran besitzt ca. einen doppelt so großen Radius wie die kleine Membran, aber die gleiche Dicke.

Mode $u(0,1)$ Zur Auslenkung der Hauptmode wird eine Kraft von $0,8 pN$ angelegt und über einen Zeitraum von 10.000.000 Schritten frei schwingen gelassen.

In Abbildung 13 sieht man das Frequenzspektrum von $u(0,1)$ der großen Membran. Die Frequenz, mit der die Hauptmode schwingt, beträgt $41,77 GHz$. Im Vergleich zur Hauptmode der kleinen Membran ist diese etwas kleiner, was zu erwarten war, da die große Membran mehr als doppelt so breit ist wie die kleine und somit mit einer kleineren Frequenz schwingen sollte. Des Weiteren sind die Frequenzen $125,4 GHz$ und $129,3 GHz$ angeregt, wobei es sich um die Hauptfrequenz der Sombromode handelt, wie weiter unten zu sehen ist.

Mode $u(1,1)$ Die Mode $u(1,1)$ wird mit einer Kraft von $1,2 pN$ auf jeweils die rechte und linke Hälfte ausgelenkt und schwingt anschließend über 20.000.000 Zeitschritte frei.

Die Mode $u(1,1)$ ist in Abbildung 14 zu sehen und besitzt die Frequenz $75,29 GHz$. Die Frequenz $183,2 GHz$ ist der Schwingungsmode $u(1,2)$ zuzuordnen. Zu sehen sind noch die Frequenzen: $40,53 GHz$, $156,6 GHz$, $255,8 GHz$ und $326,7 GHz$. Es werden hier nur die Peaks erwähnt, die deutlich ausgeprägt sind und auf dem linearen Spektrum ebenfalls erkennbar sind.

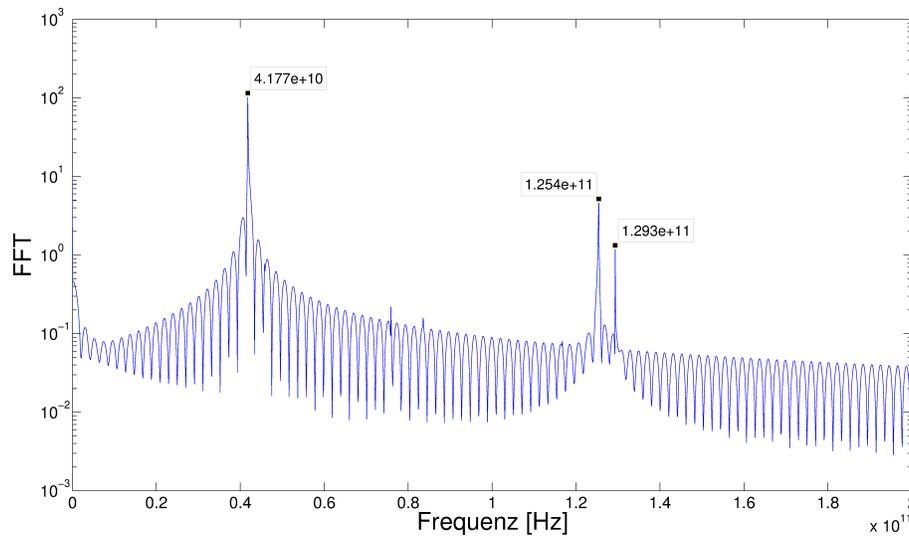


Abbildung 13: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,1)$ der großen Membran

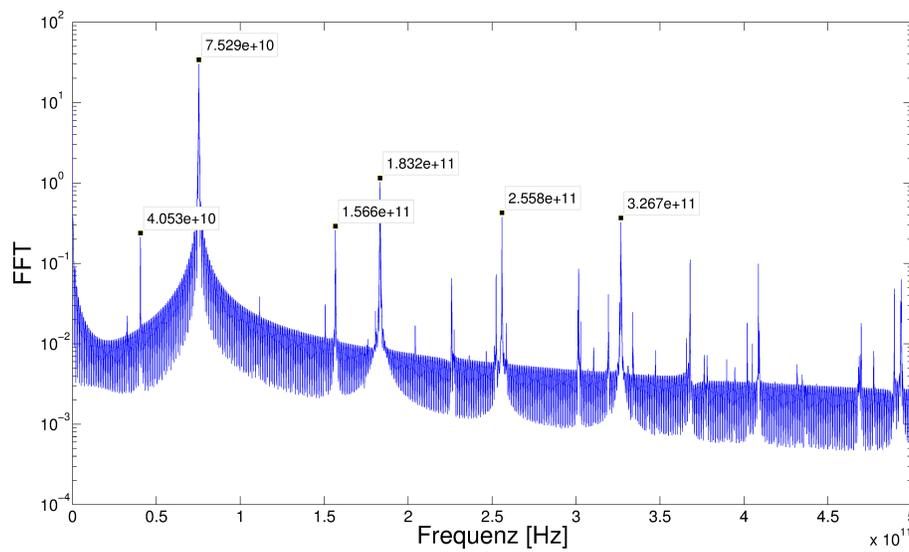


Abbildung 14: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,1)$ der großen Membran

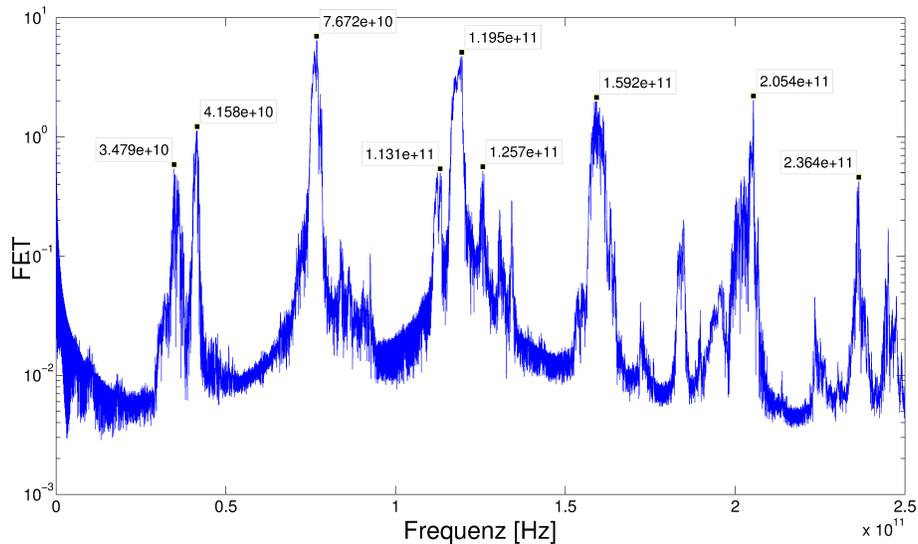


Abbildung 15: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(2,1)$ der großen Membran

Mode $u(2,1)$ Um die Mode $u(2,1)$ auszulenken wird eine Kraft von $4,8 pN$ angelegt. Die Membran schwingt über eine Zeitspanne von 30.000.000 Zeitschritten.

Die Frequenz der Mode $u(2,1)$ befindet sich bei $76,72 GHz$. Dieser Wert stimmt näherungsweise mit dem der Mode $u(1,1)$ überein, was dahergehend Sinn macht, dass in der Mode $u(2,1)$ über die jeweils 45, 135, 225 und 315 Grad Achse die Mode $u(1,1)$ vertreten ist. Die Schwingungsfrequenz der Mode $u(2,1)$ beträgt $119,5 GHz$. Allgemein sieht man bei dem Spektrum, dass sehr viele Moden sehr stark angeregt sind, da selbst im linearen Plot die Peaks der Frequenzen sehr ausgeprägt sind im Vergleich zu den Plots der anderen Moden, wo der logarithmische Plot daher gewählt wurde, damit die Peaks gut und teilweise überhaupt sichtbar gemacht werden können. Des weiteren sind die Frequenzen $119,5 GHz$, $159,2 GHz$, $41,58 GHz$, $205,4 GHz$, $34,7 GHz$, $113,1 GHz$, $125,7 GHz$ stark zu sehen. Man sieht zum Beispiel auch die Hauptmodenfrequenz bei ungefähr $41,58 GHz$. Leicht vertreten ist auch die Schwingungsfrequenz der Sombromode bei ca $125,7 GHz$.

Mode $u(1,2)$ Zur Auslenkung der Mode $u(1,2)$ der großen Membran wird eine Kraft von $0,8 pN$ gewählt. Die Membran schwingt über 10.000.000 Zeitschritte frei.

Der Hauptpeak der Mode befindet sich eindeutig bei $182,7 GHz$. Diese Frequenz ist ebenfalls im Spektrum von $u(1,1)$ zu finden. Im Gegenzug stimmt der zweite Hauptpeak bei $73,91 GHz$ näherungsweise mit dem Hauptpeak von $u(1,1)$ bei $75,29 GHz$ überein. Ebenfalls zu finden, aber nicht sehr ausgeprägt,

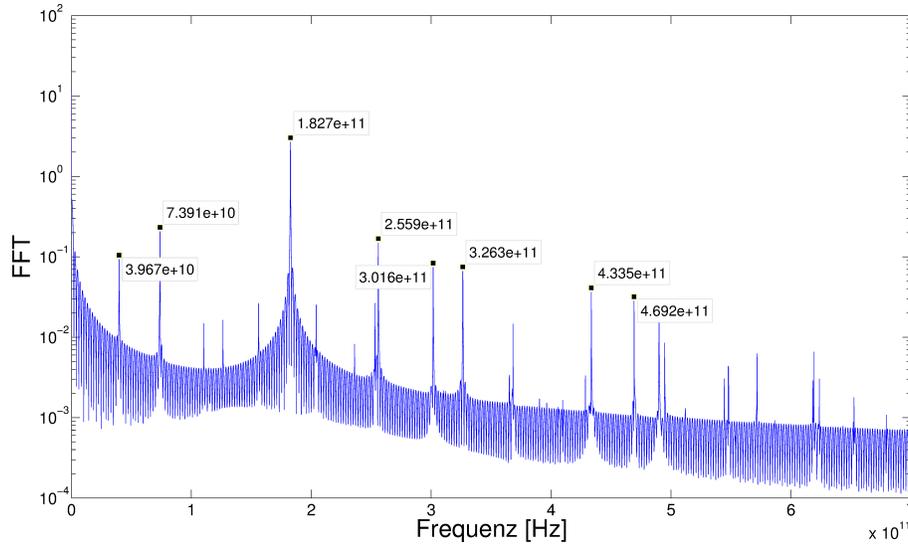


Abbildung 16: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,2)$ der großen Membran

ist die Mode $u(0,1)$ bei $39,67\text{ GHz}$. Die Hauptmode besitzt eine Frequenz von ca. $41,77\text{ GHz}$. Es sind allgemein viele Frequenzübereinstimmungen zum Spektrum von $u(1,1)$ zu finden wie beispielsweise 255 GHz und $326,7\text{ GHz}$, welche ebenfalls im Spektrum von $u(1,1)$ aufgelistet sind.

Es handelt sich hierbei um noch höhere Schwingungsmoden mit höheren Frequenzen.

Mode $u(0,2)$ Wie auch schon bei der kleinen Membran wird hier eine Näherung der Besselfunktion als Kraft angelegt mit folgender Form:

$$F = 0,0005 \cdot (0,25 \cdot (1 + \cos(r)) + 2 \cdot \cos(r/\sqrt{2}))$$

In Abbildung 17 sieht man das Spektrum nach Anregung der Mode $u(0,2)$. Die Frequenz dieser Mode beträgt $126,5\text{ GHz}$ und ist ebenfalls in den Frequenzspektren von $u(0,1)$ sowie von $u(2,1)$ vertreten. Der zweite stark ausgeprägte Peak bei $39,67\text{ GHz}$ kann man ungefähr als die Schwingungsfrequenz der Hauptmode annehmen. Die Frequenz $73,81\text{ GHz}$ könnte man der Schwingungsmode $u(1,1)$ zuordnen ($75,29\text{ GHz}$), wobei hier durchaus eine Abweichung vorhanden ist. Des weiteren findet man die Frequenz $253,1\text{ GHz}$ im Spektrum von $u(1,1)$ wieder sowie die Schwingungsfrequenz $204,1\text{ GHz}$ in dem von $u(2,1)$.

4.1.4 Dünne Membran

Die dünne Membran hat den gleichen Radius wie die große Membran, allerdings ist ihre Dicke mit einer Einheitszelle halb so groß.

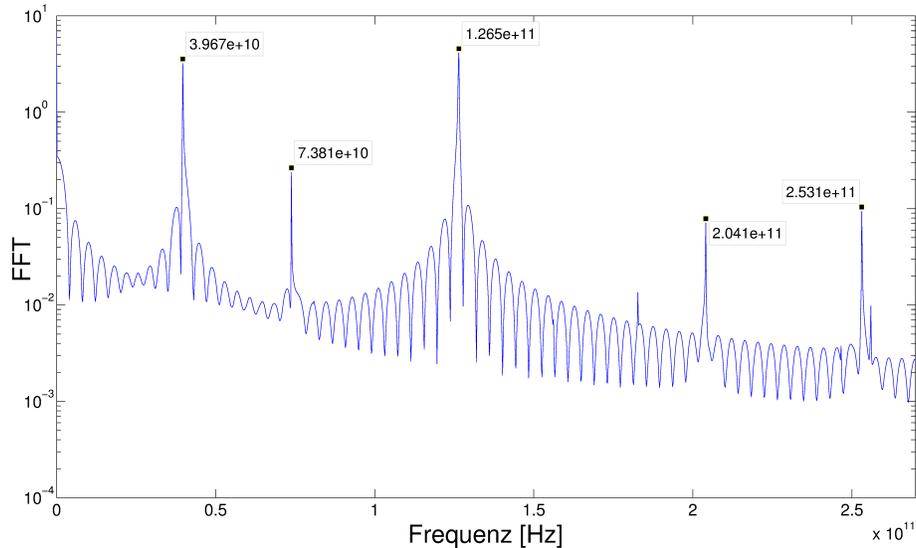


Abbildung 17: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,2)$ der großen Membran

Mode $u(0,1)$ Für die Auslenkung der Hauptmode der großen Membran wurde eine Kraft von $0,64 \text{ pN}$ angelegt, welche dann über 10.000.000 Zeitschritte frei schwingt.

Sehr schnell ist zu erkennen, dass es sich bei der Frequenz $36,33 \text{ GHz}$ um die der Hauptmode handelt. Wiederzufinden ist diese näherungsweise in den Spektren von $u(1,1)$ und $u(2,1)$, mit etwas größerer Abweichung auch in den Spektren von $u(1,2)$ und $u(0,2)$. Zu sehen sind noch weitere angeregte Schwingungsfrequenzen, die allerdings keiner Frequenz, der hier behandelten Moden entsprechen, und es sich somit aller Wahrscheinlichkeit nach um höhere Moden handelt. Die weiteren vertretenen Frequenzen sind: $92,22 \text{ GHz}$, $163,3 \text{ GHz}$, $164,8 \text{ GHz}$, $108,9 \text{ GHz}$, $90,69 \text{ GHz}$, $19,65 \text{ GHz}$ und 133 GHz . Die Frequenz $90,69 \text{ GHz}$ ist ebenfalls im Spektrum von $u(1,1)$ zu finden, sowie die Frequenz 133 GHz noch in den Spektren von $u(1,1)$, $u(1,2)$ und $u(0,2)$.

Mode $u(1,1)$ Um die Mode $u(1,1)$ auf der dünnen Membran auszulenken wird eine Kraft von $1,2 \text{ pN}$ angelegt. Nachdem sie losgelassen wird schwingt sie über einen Zeitraum von 50.000.000 Schritten frei.

Am stärksten ist hier die Frequenz $34,86 \text{ GHz}$ zu sehen. Da diese aber sehr nah an der Schwingungsfrequenz der Hauptmode liegt, kann man davon ausgehen, dass das nicht die Frequenz der Mode $u(1,1)$ ist. Weiter unten wird dieses Ergebnis mithilfe von Frequenzverhältnissen auch nochmal verifiziert. Man kann nun davon ausgehen dass es sich bei dem Peak bei $58,50 \text{ GHz}$ um die Schwingungsfrequenz der Hauptmode handelt. Darüber hinaus gibt es noch den Frequenzpeak bei $82,76 \text{ GHz}$, welcher die Frequenz der Mode $u(2,1)$ dar-

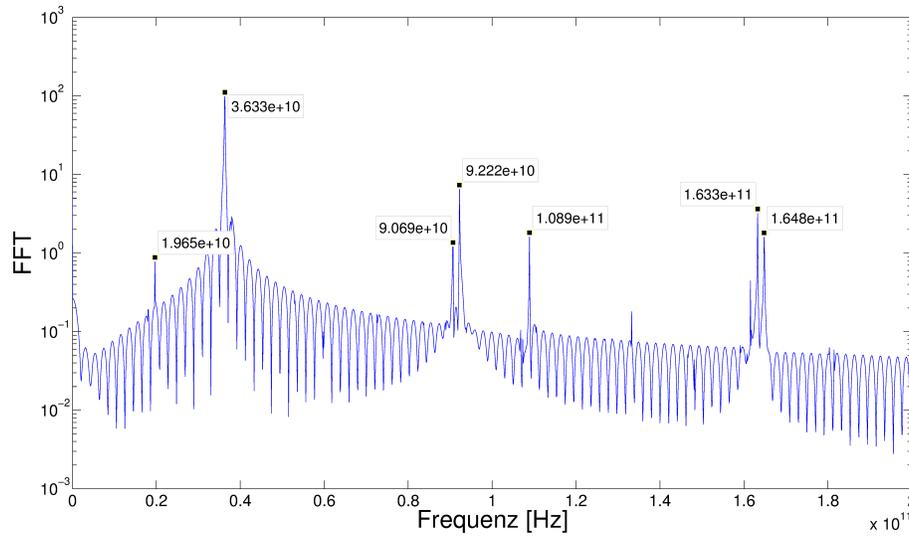


Abbildung 18: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,1)$ der dünnen Membran

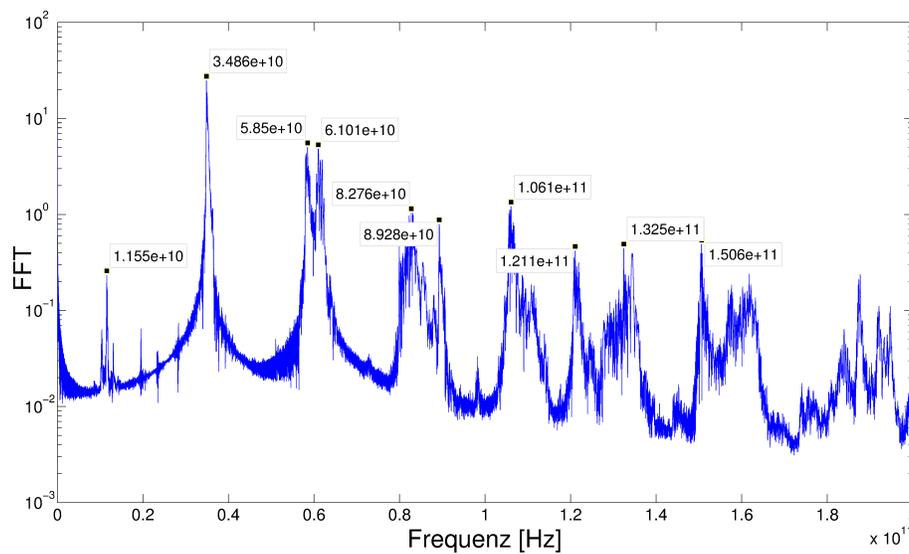


Abbildung 19: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,1)$ der dünnen Membran

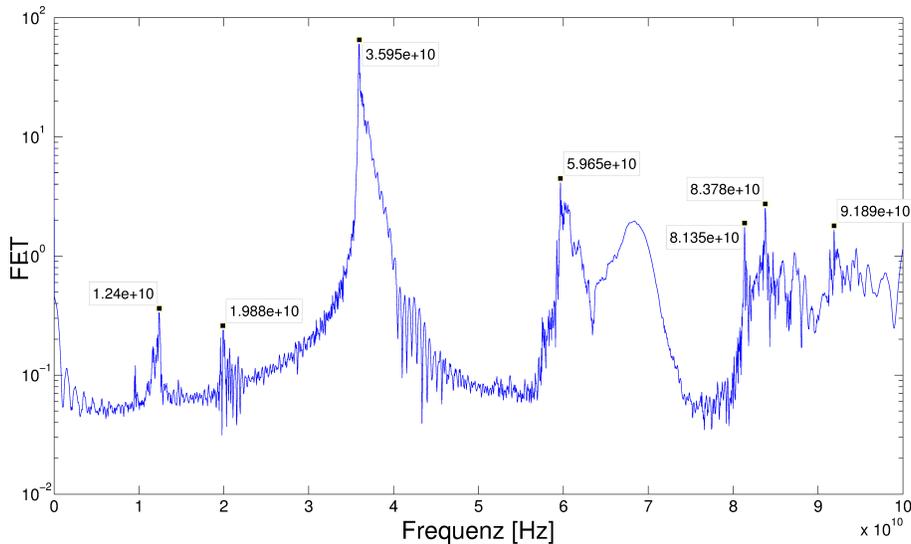


Abbildung 20: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(2,1)$ der dünnen Membran

stellt, deren Spektrum den Peak bei $83,78\text{ GHz}$ hat. Die Frequenz $91,89\text{ GHz}$ ist zudem im Spektrum von $u(0,1)$ wiederzufinden, wobei es hierbei nicht um die Hauptfrequenz geht. Weitere Frequenzen, die in diesem Spektrum zu sehen sind, betragen: $61,01\text{ GHz}$, $106,1\text{ GHz}$, $11,55\text{ GHz}$, $89,28\text{ GHz}$, $132,5\text{ GHz}$, $121,1\text{ GHz}$ und $150,6\text{ GHz}$. Letztere ist ebenfalls in den Spektren von $u(1,2)$ und $u(0,2)$ aufzufinden.

Mode $u(2,1)$ Um die Mode $u(2,1)$ auszulenken wird eine Kraft von $4,8\text{ pN}$ angelegt und die dünne Membran für $20.000.000$ Zeitschritte frei schwingen gelassen.

Auch hier ist hauptsächlich die Hauptschwingungsmode mit 36 GHz angeregt was allerdings daran liegen kann, dass die Membran sehr groß ist und dahergehend die Moden nicht sauber schwingen. Der zweithöchste Peak bei $59,7\text{ GHz}$ ist der Schwingungsfrequenz der Mode $u(1,1)$ zuzuordnen. Dahergehend ist anzunehmen, dass es sich bei der Frequenz $83,78\text{ GHz}$ um die der Mode $u(2,1)$ handelt. Diese Frequenz ist ebenfalls im Spektrum der Schwingung nach Anregung der Mode $u(1,1)$ wiederzufinden. Darüber hinaus sind die Schwingungsfrequenzen: $81,35\text{ GHz}$, $91,89\text{ GHz}$, $12,4\text{ GHz}$ und $19,88\text{ GHz}$ vertreten.

Mode $u(1,2)$ Es wird eine Kraft von $0,8\text{ pN}$ an die dünne Membran angelegt um diese in die Mode $u(1,2)$ auszulenken. Sie schwingt über einen Zeitraum von $10.000.000$ Schritten frei.

In dem logarithmisch aufgetragenen Frequenzspektrum von $u(1,2)$ ist der Hauptpeak bei einer Frequenz von 119 GHz zu vermerken. Im Vergleich zu den Mo-

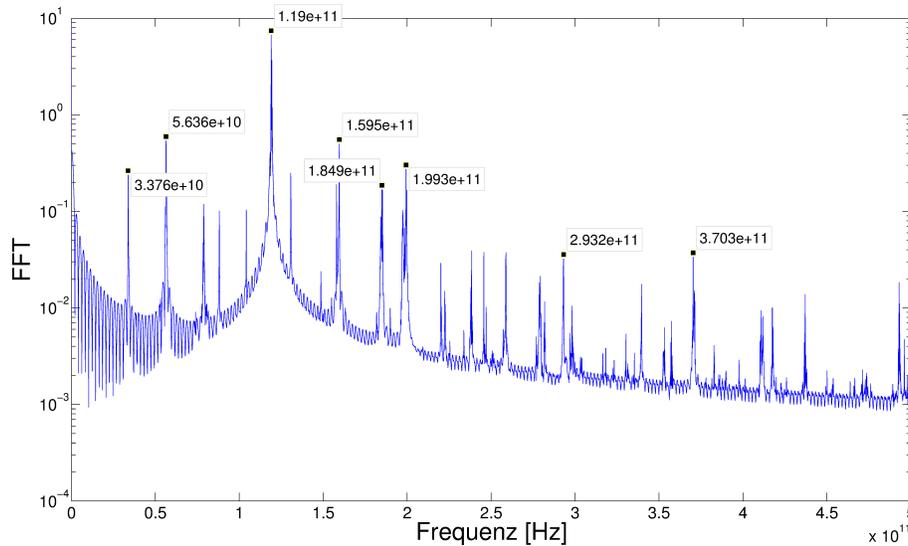


Abbildung 21: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(1,2)$ der dünnen Membran

den $u(1,1)$ und $u(2,1)$ ist der Hauptpeak auch gleichzeitig die Frequenz mit der diese schwingen sollte. Am zweitstärksten ist die Frequenz $56,36 \text{ GHz}$ der Mode $u(1,1)$ vertreten. Weiterhin sind Moden mit den Frequenzen $159,5 \text{ GHz}$, $33,76 \text{ GHz}$, $199,3 \text{ GHz}$, $130,7 \text{ GHz}$ und $184,9 \text{ GHz}$ vorhanden. Wie schon an den hohen Zahlen zu erkennen ist, handelt es sich hierbei um noch höhere Schwingungsmoden mit Ausnahme der Frequenz $33,76 \text{ GHz}$, welche ebenfalls im Spektrum von $u(0,2)$ zu finden ist.

Mode $u(0,2)$ Die Mode $u(0,2)$ wird mit der gleichen Kraft ausgelenkt wie bei der großen Membran und über 20.000.000 Zeitschritte frei schwingen gelassen. In der Abbildung 22 ist das Spektrum von $u(0,2)$ der dünnen Membran zu sehen. Die Frequenz der sogenannten Sombromode beträgt $86,9 \text{ GHz}$, was sehr nahe an der Frequenz der Mode $u(2,1)$ liegt. Der zweithöchste Peak befindet sich bei der Schwingungsfrequenz $33,66 \text{ GHz}$. Man könnte annehmen, dass es sich hierbei um die Hauptmode bei $36,33 \text{ GHz}$ handelt. Ebenfalls gut zu erkennen ist die Frequenz $56,12 \text{ GHz}$, welche man der Mode $u(1,1)$ mit der Frequenz $58,5 \text{ GHz}$ zuordnen könnte.

4.1.5 Vergleich Theorie

Um einen Vergleich mit der Theorie herzustellen wir das Verhältnis von der Schwingungsfrequenz der Hauptmode zu den jeweiligen angeregten Moden erstellt.

In Tabelle 2 werden die Verhältnisse der Frequenzen der einzelnen Schwingungs-

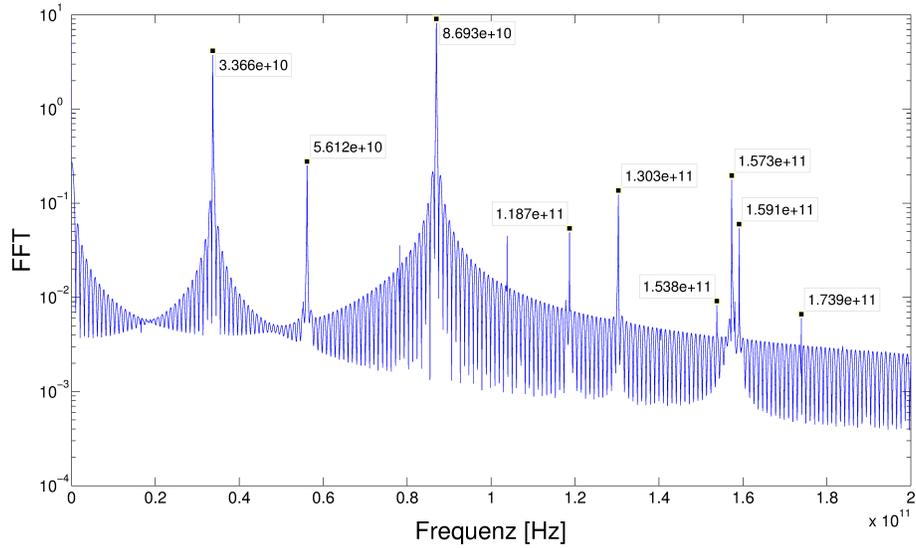


Abbildung 22: Logarithmisch aufgetragenes Frequenzspektrum von $u(0,2)$ der dünnen Membran

Membran	$\frac{u(1,1)}{u(0,1)}$	$\frac{u(2,1)}{u(0,1)}$	$\frac{u(1,2)}{u(0,1)}$	$\frac{u(0,2)}{u(0,1)}$
Klein	1,8528	2,8124	-	3,0706
Groß	1,8025	2,8609	4,3739	3,0285
Dünn	1,6102	2,3061	3,2756	2,3919
Theorie	1,5935	2,1356	2,9173	2,2954

Tabelle 2: Verhältnisse der jeweiligen Frequenzen der Schwingungsmoden zur Hauptmode. Vergleich mit Theoriewerten

Mode	λ_{mna}
$u(0, 1)$	2,405
$u(1, 1)$	3,832
$u(2, 1)$	5,136
$u(1, 2)$	7,016
$u(0, 2)$	5,520

Tabelle 3: verwendete Literaturwerte[3]

	$u(0, 1)$	$u(1, 1)$	$u(2, 1)$	$u(1, 2)$	$u(0, 2)$
Klein	165,8	307,2	466,3	-	509
Groß	41,77	75,29	119,5	183	126,5
Dünn	36,33	58,5	83,78	119	86,9

Tabelle 4: Frequenzen der Schwingungsmoden im Überblick. Angaben in GHz

moden dargestellt. Die Werte dieser können aus dem Abschnitt 4.1 entnommen werden. Für die Theoriewerte wurden die Frequenzwerte aus Tabelle 3 verwendet.

In Tabelle 2 ist die Übereinstimmung mit den Theoriewerten gut zu sehen. Da für die Theorie eine Platte mit einer verschwindenden Dicke angenommen wird, ist zu erwarten, dass die simulierten Ergebnisse für die dünne Membran am besten übereinstimmen müssten, was hier auch der Fall ist. Die Abweichung vom Theoriewert für die kleine Membran, welche im Verhältnis zu ihrem Radius eine große Dicke besitzt, ist im Vergleich zu den beiden anderen Membranen am höchsten. Die Quotienten für die große Membran lassen sich mit der vorgeschlagenen Theorie ebenfalls schlecht vergleichen. Für die dünne Membran, die eine sehr kleine Dicke besitzt relativ zu ihrem Durchmesser, stimmen die Ergebnisse mit der Theorie ziemlich gut überein. Die Abweichungen für die dünne Membran betragen 1.08%, 7.98%, 12.28% und 4.2%.

4.1.6 Heizen

In diesem Abschnitt werden die 3 Membranen auf 300K geheizt um herauszufinden welche Moden thermisch angeregt werden.

Hierzu eine Auflistung der Frequenzen der verschiedenen Moden der Membranen. Die Spektren der geheizten Membranen kann man in den Abbildungen 23-25 sehen.

In den Frequenzspektren der geheizten Membranen können die Frequenzen der Schwingungsmoden sehr gut wiedergefunden werden. Es gibt allerdings eine kleine Frequenzverschiebung, die sich dadurch erklären lässt, dass das Material mit zunehmender Temperatur weicher wird, und daher die Frequenzen sich verringern. Eine Übersicht mit dem Vergleich 0K-300K ist in Tabelle 5 zu finden.

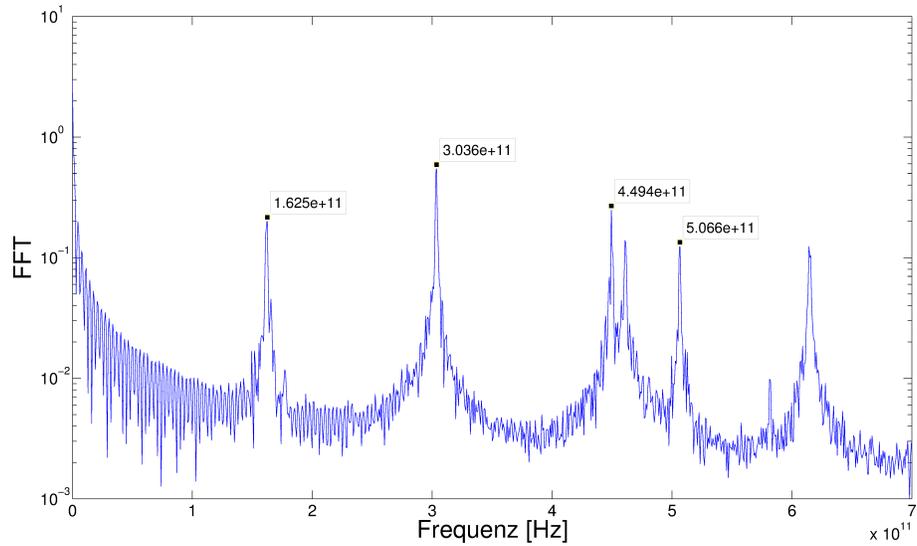


Abbildung 23: Logarithmisch aufgetragener Plot des Frequenzspektrums der kleinen Membran bei 300K, keine Auslenkung

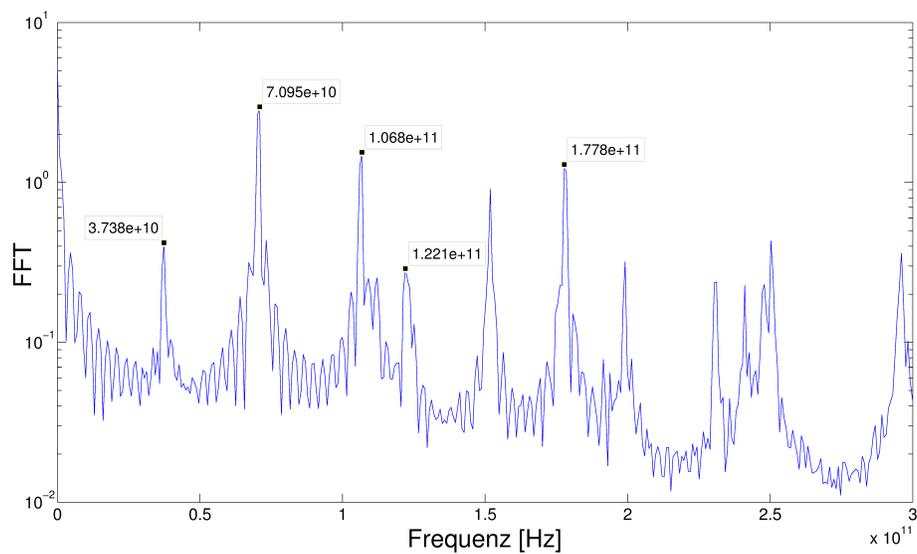


Abbildung 24: Logarithmisch aufgetragener Plot des Frequenzspektrums der großen Membran bei 300K, keine Auslenkung

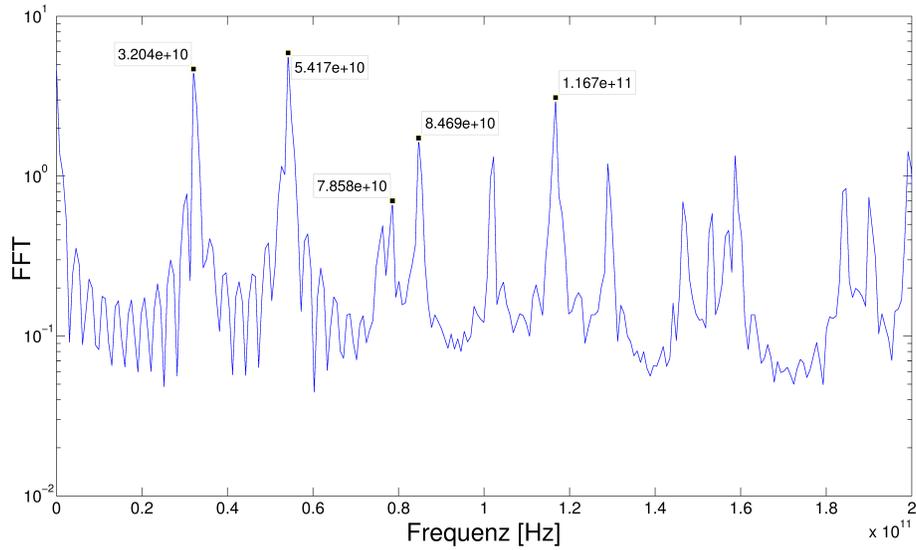


Abbildung 25: Logarithmisch aufgetragener Plot des Frequenzspektrums der dünnen Membran bei 300K, keine Auslenkung

	$u(0, 1)$	$u(1, 1)$	$u(2, 1)$	$u(1, 2)$	$u(0, 2)$
Klein (0K)	165,8	307,2	466,3	-	509
Klein (300K)	162,5	303,6	449,4	-	506,6
Groß (0K)	41,77	75,29	119,5	183	126,5
Groß (300K)	37,38	70,95	106,8	122,1	177,8
Dünn (0K)	36,33	58,5	83,78	119	86,9
Dünn (300K)	32,04	54,17	78,58	84,69	116,7

Tabelle 5: Vergleich Frequenzen bei 0K und 300K. Angaben in GHz

	$u(0, 1)$	$u(1, 1)$	$u(2, 1)$	$u(1, 2)$	$u(0, 2)$
kleine Membran	5,382	6,156	25,39	-	984,5
große Membran	2,406	0,792	-	0,118	67,36
dünne Membran	1,007	15,44	115,8	31,94	0,029

Tabelle 6: Dämpfungskoeffizienten der verschiedenen Membranen bei Auslenkung in die verschiedenen Moden. Angaben in $[1/fs]$

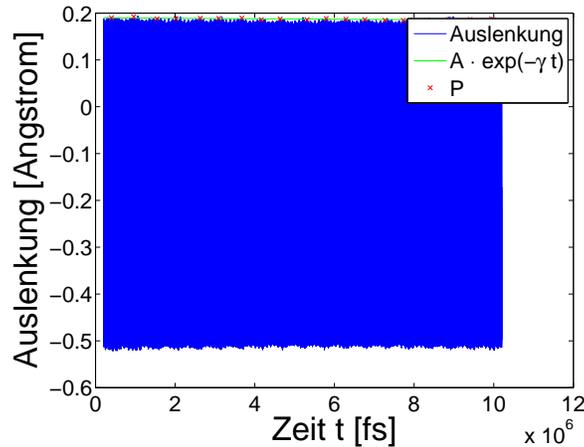


Abbildung 26: Exponentialfit an die Schwingungsverläufe der kleinen Membran bei Auslenkung in Mode $u(1, 2)$

4.2 Dämpfung

In diesem Abschnitt werden die Dämpfungen der Membranen nach Auslenkung in die Moden untersucht. Hierzu werden bestimmte, sinnvoll gewählte, schwingende Punkte auf der Membran ausgesucht, welche die maximale Auslenkung besitzen, und werden über die Zeit aufgetragen. Da nicht alle Membranen immer regelmäßig schwingen, werden per Hand Punkte in Matlab auf der Einhüllenden des Schwingungsverlaufes markiert, die den Abfall sinnvoll wiedergeben. Durch diese gewählten Punkte wird dann eine abfallende Exponentialfunktion gefittet, welche die Dämpfung liefert [2].

$$f(t) = A \cdot \exp(-\gamma t) \quad (45)$$

Die Parameter werden hier über den linearen Ausgleich der Extremwerte errechnet. γ ist der gesuchte Dämpfungskoeffizient.

In Tabelle 6 sind alle errechneten Dämpfungskoeffizienten aufgelistet.

In Abbildung 26-28 sind beispielhaft ein paar Schwingungsverläufe dargestellt mit dem dazugehörigen Exponentialfit. Wie man der Tabelle und den Bildern entnehmen kann tritt keine wirklich starke Dämpfung auf. Der einzige Ausreißer ist Mode $u(0, 2)$, wobei hier die Auslenkung sehr schwer zu bewerkstelligen war

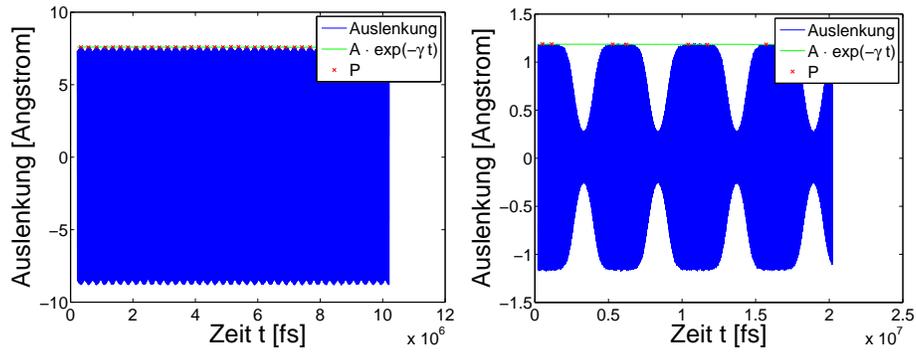


Abbildung 27: Exponentialfit an die Schwingungsverläufe der großen Membran bei Auslenkung in Mode $u(0, 1)$ (links) und Mode $u(1, 1)$ (rechts)

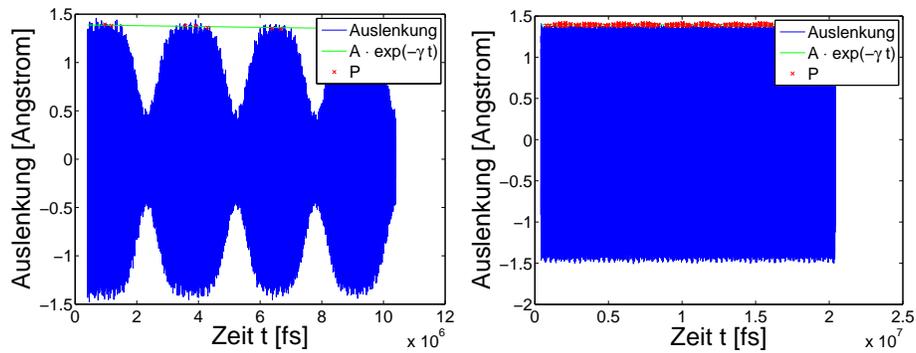


Abbildung 28: Exponentialfit an die Schwingungsverläufe der dünnen Membran bei Auslenkung in Mode $u(1, 2)$ (links) und Mode $u(0, 2)$ (rechts)

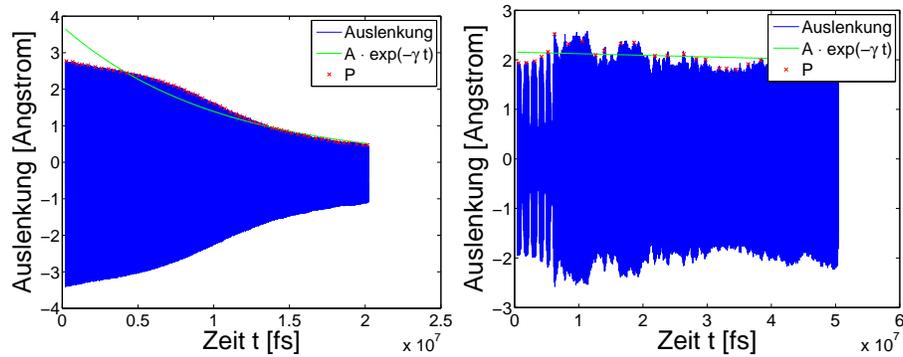


Abbildung 29: Exponentialfit an die Schwingungsverläufe der kleinen Membran bei Auslenkung in Mode $u(0, 2)$ und rechts bei Auslenkung der dünnen Membran in Mode $u(1, 1)$

aufgrund der Dicke der Membran und daher angenommen werden muss, dass es sich nicht mehr um den linearen Bereich der Auslenkung handelt. In Abbildung 28 ist der Schwingungsverlauf der Sombrero-Mode zu sehen. In der Abbildung kann man auch erkennen, dass der Exponentialfit sich nicht gut eignet zur Berechnung der Dämpfungskonstante für diese Mode. Weitere Probleme bereitet die Berechnung der Dämpfung der Mode $u(1, 1)$ der dünnen Membran (siehe Abb. 28). Auf den Effekt, der hier in den ersten paar Millionen Zeitschritten auftritt, wird im Abschnitt 4.3 eingegangen.

Allgemein kann jedoch festgehalten werden, dass die Dämpfungen sehr gut mit der Methode bestimmt werden konnten. Die Dämpfung fällt nicht sehr stark aus, was bei Silizium, vor allen Dingen bei OK, zu erwarten war.

4.3 Modentransfer

Im Laufe der Studien, die an den Nanomembranen, durchgeführt wurden, ist ein interessanter Effekt aufgetreten. Bei Auslenkung in die Mode $u(1, 1)$ wurde bei jeder Membran ein “Modentransfer” oder “Modenkopplung” beobachtet.

In Abbildung 30 und 31 sind die Schwingungsverläufe von 2 Punkten auf der kleinen Membran wiedergegeben. Dabei handelt es sich um die Punkte auf dem zweiten Radius, bei jeweils 0, 90, 45 und 135 Grad (vgl. Abbildung 7). Die Punkte, die um 90 Grad verschoben sind, befinden sich jeweils in einem Bild. Alle Punkte, die um 180 Grad versetzt sind, verhalten sich analog.

Das Auftreten dieses Verhaltens ist scheint unabhängig von der Größe und der Dicke der Membranen zu sein, da es bei allen auftaucht. Es konnte jedoch beobachtet werden, dass dieser Modentransfer eine Minimalauslenkung erfordert. Man kann sehen, dass sich die Schwingungsebene mit der Zeit dreht, sodass die Mode um 90 Grad versetzt schwingt über einen gewissen Zeitraum, um dann wieder in die Ursprungsschwingung zurückzukehren. Dieser Effekt wurde bei Nanobrücken ebenfalls beobachtet. Dass dieser Effekt existiert hat seine

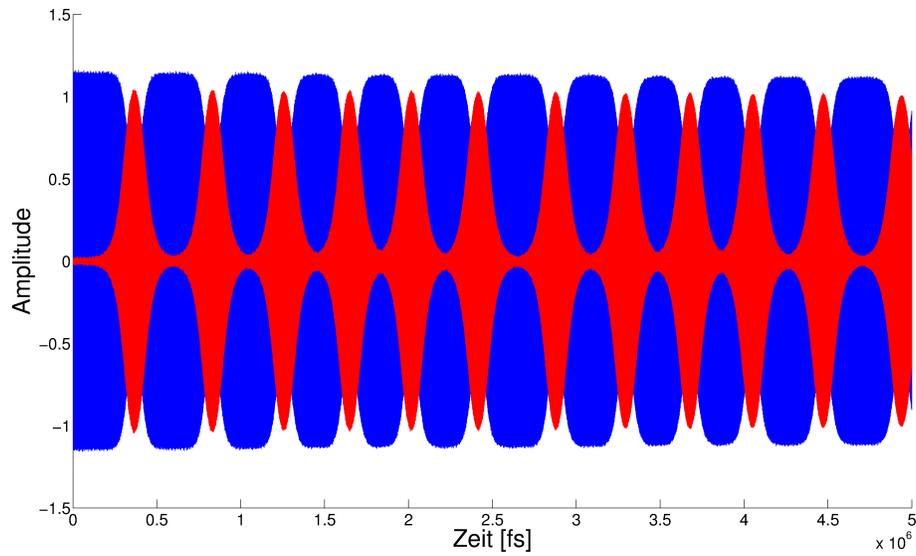


Abbildung 30: Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der kleinen Membran (0 & 90 Grad) in Angstrom.

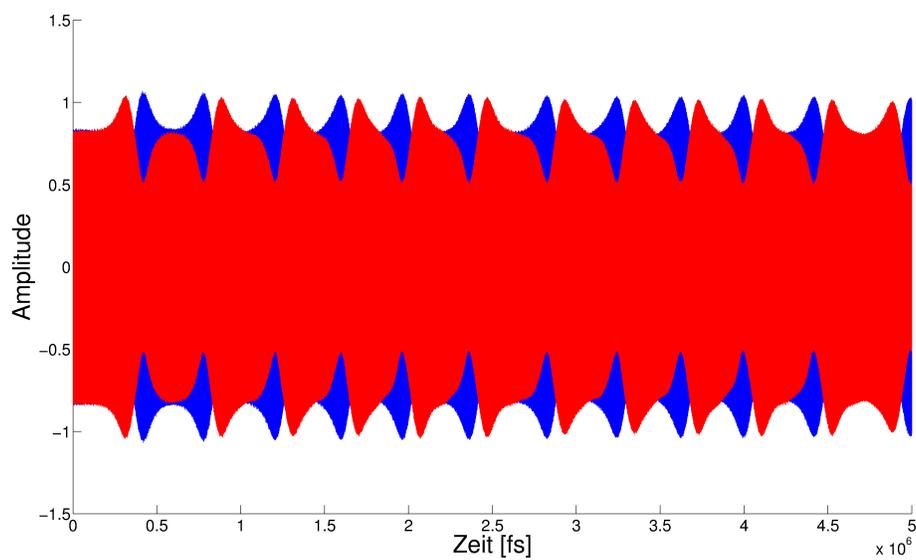


Abbildung 31: Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der kleinen Membran (45 & 135 Grad) in Angstrom.

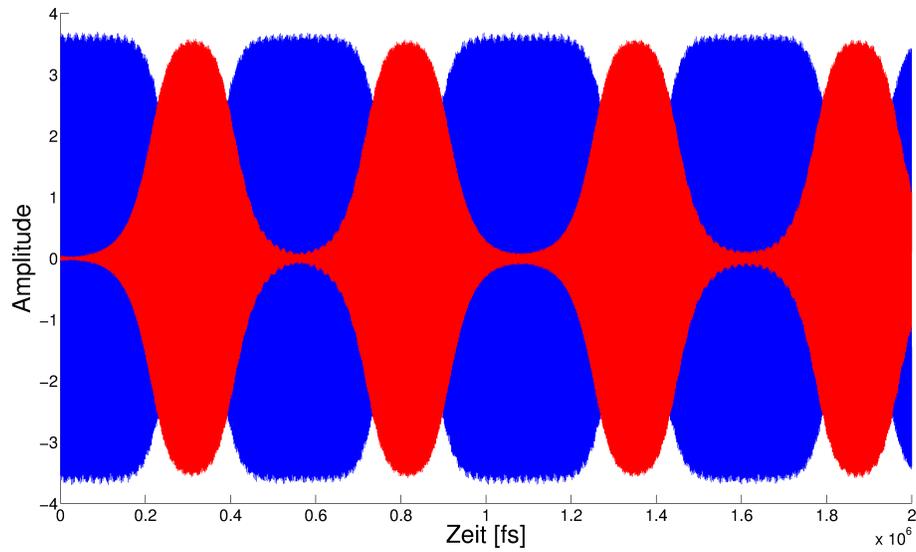


Abbildung 32: Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der großen Membran (180 & 270 Grad) in Angstrom.

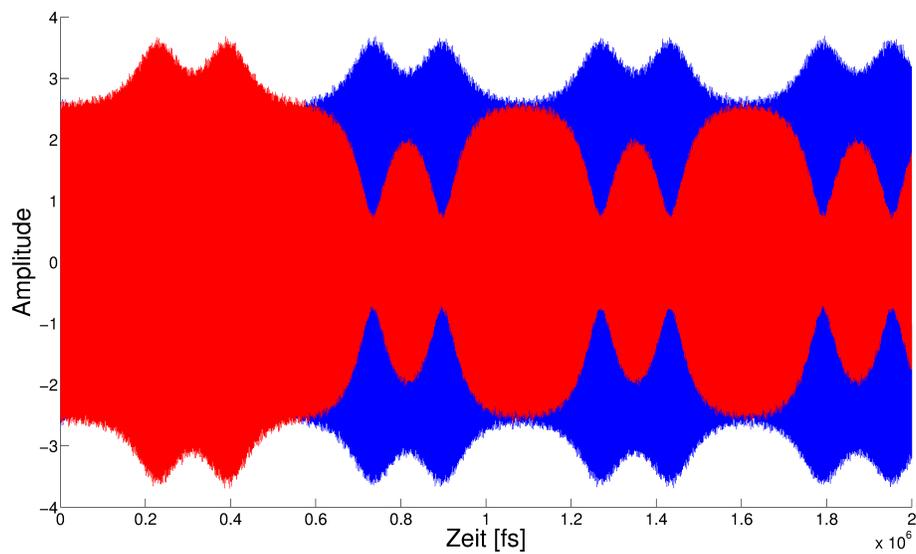


Abbildung 33: Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der großen Membran (135 & 225 Grad) in Angstrom

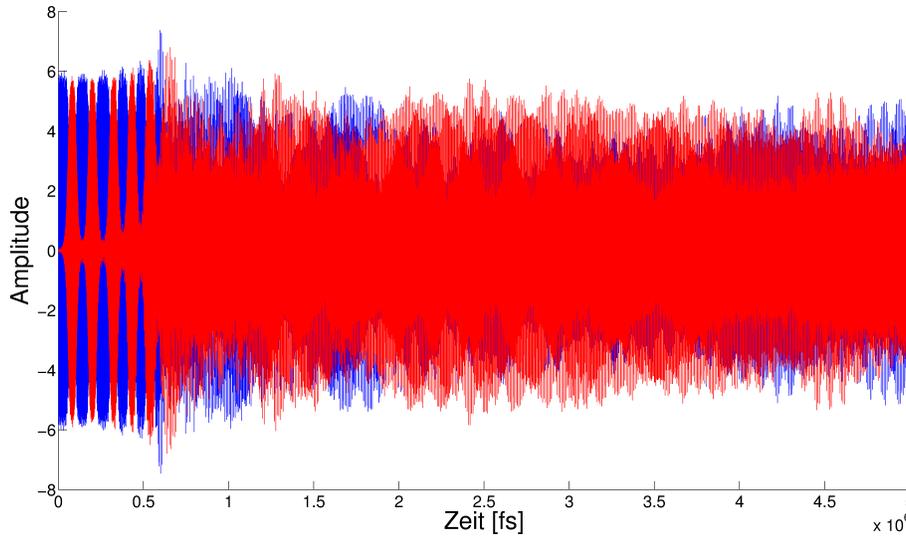


Abbildung 34: Schwingungsamplituden zweier um 90 Grad versetzter Punkte auf der großen Membran (0 & 90 Grad) in Angstrom.

Begründung darin, dass zwei Moden mit ungefähr derselben Frequenz sich gegenseitig anregen. Allerdings ist momentan die Dynamik dieses Transfers noch nicht hinreichend erforscht um sagen können, wann genau welche Schwingungsform auftritt.

Bei der dünnen Membran (Abb. 34) tritt der Effekt die ersten Millionen Zeitschritte auf, jedoch ist der Radius im Verhältnis zu der Dicke der Membran sehr groß, weswegen die Membran ab einem gewissen Zeitpunkt sehr unregelmäßig schwingt. Dieser “Modentransfer” konnte darüberhinaus ebenfalls bei der Schwingung der Mode $u(1,2)$ der dünnen Membran beobachtet werden.

5 Zusammenfassung

Zum einen hat sich diese Studie zuerst mit dem Thema beschäftigt wie die verschiedenen Schwingungsmoden der Nanomembranen gut angeregt werden können. Nachdem die maximale Auslenkung durch Anlegen einer Kraft erreicht wurde, wurde die Kraft abgestellt und die Membranen frei schwingen gelassen. Dieses Schwingungsverhalten wurde in Abschnitt 4 analysiert.

Es wurden hier die Schwingungsfrequenzen, die Schwingungsform, Dämpfung und der aufgetretene “Modentransfer” untersucht.

Herausgefunden wurde, dass die Anregung der Schwingungsmoden der Silizium-Nanomembranen bei 0K, bis auf ein paar Einzelfälle, gut funktioniert hat. Die Schwingungsmoden konnten in den Fourierspektren eindeutig wiedergefunden und zugeordnet werden. In den linearen Plots waren eindeutige Schwingungspeaks zu sehen, die darauf schließen lassen, dass die Membranen relativ rein in

der angeregten Mode geschwungen sind. Der Übersicht halber wurden im Auswertungsteil allerdings nur die logarithmischen Plots eingefügt weil auf diesen die weiteren angeregten Moden auch zu sehen sind. Man sieht immer wieder auftretende Schwingungsfrequenzen, sowie, dass auch höhere Moden unbeabsichtigt angeregt werden, jedoch die Häufigkeit dieser Frequenzen verschwindend gering ist. Sehr gut wiederzufinden waren alle Schwingungsfrequenzen ebenfalls in den auf 300K geheizten Membranen.

Es konnte darüberhinaus festgestellt werden, dass die kleine Membran unvoreilhaftige Ausmaße besitzt für die Auslenkung in höhere Moden als $Mode_{u(1,1)}$. Die große Membran eignet sich sehr gut für die Auslenkungen in die verschiedenen Moden. Beim Vergleich mit der Theorie wird allerdings festgestellt, dass die dünne Membran die meiste Übereinstimmung findet, da für die Theorie meist von einer dünnen Platte mit verschwindend geringer Dicke ausgegangen wird. Die "Thin Plate Theory" sowie die "Thick Plate Theory" wurden im Laufe der Studie untersucht, allerdings waren die Übereinstimmungen nicht sonderlich gut.

In Abschnitt 4.2 wird die Dämpfung behandelt. Da es sich hier allerdings um Silizium-Membranen bei 0K handelt, besitzen die Membranen kaum eine Dämpfung.

In Abschnitt 4.5 wird ein interessanter Effekt dargestellt, der im Laufe der Studie zum Vorschein kam.

Literatur

- [1] Kristian Scholz. Simulation elastischer Eigenschaften von Nanobrücken. Diplomarbeit, Universität Konstanz, 2011.
- [2] Ralf Schmid. Computersimulation von Nanobrücken mit Fehlstellen. Bachelorarbeit, Universität Konstanz, 2012.
- [3] Singiresu S. Rao. Vibration of Continuous Systems. John Wiley and Sons, 2007.
- [4] Frank H. Stillinger and Thomas A. Weber. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys. Rev. B*, 31(8) pp. 5262 (1985).
- [5] Paul Schafheitlin. Die Theorie der Besselschen Funktionen. BiblioBazaar, 2009.
- [6] Desy MHFe-WIKI: Bessel-Funktion. <https://mhf-e-wiki.desy.de/index.php?title=Bessel-Funktion&oldid=2821>
- [7] Wikipedia: Vibrations of a circular membrane. http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Vibrations_of_a_circular_membrane&oldid=602082696
- [8] Thomas Möller. Numerische Studien zur Dynamik von Nanobrücken spezieller Siliziumverbindungen. Bachelorarbeit, Universität Konstanz, 2013.
- [9] LAMMPS ("Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator"). <http://lammmps.sandia.gov>
- [10] D. Frenkel & B. Smit. Understanding Molekular Simulation. Academic Press / Elsevier, 2002.
- [11] Markus Ring. Computersimulations of the Dynamics of Nanomembranes. Masterarbeit, Universität Konstanz, 2013.
- [12] N, Grønbech-Jensen, N. R. Hayre, Oded Farago. A new Langevin thermostat for fast and accurate molecular simulations. arXiv:1303.7011 [cond-mat.mtrl-sci], 2013.