

Computersimulationen von Vielteilchensystemen

Projekt 1: Molekulardynamik: Lennard-Jones-Gas im NVE-Ensemble

In der Molekulardynamik wird das Verhalten klassischer Vielteilchensysteme durch die NEWTON'sche Mechanik approximiert. Die Wechselwirkung der Teilchen untereinander wird über semiempirische Potentiale beschrieben. In diesem Projekt soll das physikalische Verhalten eines Teilchengases mit Lennard-Jones-Wechselwirkung untersucht werden. Ziel ist es thermodynamische Größen wie Temperatur und Druck, sowie die Paarverteilungsfunktion zu bestimmen.

Durchführung:

- Schreiben Sie ein Programm, welches ein Lennard-Jones-Gas im NVE-Ensemble mittels Molekulardynamik (Velocity-Verlet-Algorithmus) simuliert.
- Schreiben Sie weiterhin eine Sampleroutine, welche mittlere Temperatur $\langle T \rangle_{N,V,E}$ und Druck $\langle p \rangle_{N,V,E}$ berechnet.
- Schreiben Sie ein Programm, welches die Paarverteilungsfunktion $g(r)$ als Mittel über mehrere Konfigurationen nähert.
- Zusatz: Erweitern Sie das Programm auf das NVT-Ensemble indem Sie ein Anderson Thermostat integrieren.

Literatur:

- D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications.*, Academic Press(1996), Kapitel 4.1/4.2 und 6.1.1