



Numerische Simulationsverfahren im Ingenieurwesen

Übungsblatt 7

**Lennard-Jones-Potenzial u. periodische RB**

In der Datei `md-rahmencode.m` ist der Rahmencode für eine Molekulardynamik-Simulation vorbereitet. Das 'Simulationsvolumen' ist ein Würfel mit der Kantenlänge  $maxx$ . Es sollen periodische Randbedingungen implementiert werden. Die Zeitintegration soll mit dem Geschwindigkeit-Verlet-Algorithmus erfolgen. Im Kopf des Programmes sind bereits die (normierten) Parameter definiert.

Implementieren Sie die Wechselwirkung der Moleküle mit einem (6,12)Lennard-Jones-Potenzial (Potenzialtiefe  $U_0$ , Gleichgewichtsentfernung  $s$ ) und Abschneideradius  $r_c$ . Vergessen Sie nicht die Moleküle 'hinter dem Rand' zu berücksichtigen. Durch die Wahl der Parameter ist die 'minimal image convention' erfüllt.

Zeit zur Bearbeitung: 60 Minuten