



Numerische Simulationsverfahren im Ingenieurwesen

12.01.2012

Übungsblatt 9

Lennard-Jones-Potenzial u. periodische RB

In der Datei `lenjon_rc.m` ist der Rahmencode für eine Molekulardynamik-Simulation mit einem Lennard-Jones-Potenzial vorbereitet. Das 'Simulationsvolumen' ist ein Würfel mit der Kantenlänge L . Die Zeitintegration mit dem Geschwindigkeit-Verlet-Algorithmus ist bereits in wesentlichen Punkten enthalten. Im Kopf des Programmes sind die (normierten) Parameter definiert.

Implementieren Sie die Berechnung der Molekülabstände unter Berücksichtigung periodischer Randbedingungen. Durch die Wahl der Parameter ist die 'minimal image convention' erfüllt.

Zeit zur Bearbeitung: 60 Minuten