



Numerische Simulationsverfahren im Ingenieurwesen

10.01.2013

Übungsblatt 7

Lennard-Jones-Potenzial u. periodische RB

In der Datei `lenjon_rc.m` ist der Rahmencode für eine 2D-Molekulardynamik-Simulation mit einem Lennard-Jones-Potenzial vorbereitet. Das 'Simulationsvolumen' ist ein Quadrat 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.

Zusatz:

1. Erweitern Sie die Simulation auf drei Dimensionen.
2. Markieren Sie in der grafischen Ausgabe solche Molekülpaare, deren Abstände annähernd dem Gleichgewichtsabstand entsprechen.

Zeit zur Bearbeitung: 90 Minuten