

## 11. Übungsblatt zur Statistische Physik II

**Abgabe (Einzelabgabe):** Zwei Wochen nach der Ausgabe im Tutorium.

### **Aufgabe 1 :** *Molekulardynamik-Simulation eines Lennard-Jones Gases (20 Punkte)*

Betrachten Sie ein aus  $N = 128$  Teilchen bestehendes Lennard-Jones Gas in zwei Dimensionen. Zur Zeit  $t = 0$  sind die Teilchen auf einem Gitter in der Box  $x, y \in [0, 4]$  angeordnet und haben zufällige Geschwindigkeiten. Die Teilchen wechselwirken paarweise mit dem Lennard-Jones Potential:

$$\phi_{LJ}(r) = 4\epsilon \left( \frac{\sigma}{r^{12}} - \frac{\sigma}{r^6} \right)$$

Schreiben Sie ein Simulationsprogramm mit Hilfe eines Geschwindigkeitsverlet-Algorithmus. Verwenden Sie periodische Randbedingungen und reduzierte Einheiten. Bestimmen Sie die folgenden Observablen:

1. Kinetische Energie  $E_{kin} = \sum_{j=1}^N \frac{\mathbf{v}_j(t)^2}{2}$
2. Potentielle Energie  $E_{pot} = \sum_{j=1}^N \sum_{k>j} \phi(|\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_k(t)|)$
3. Gesamtenergie  $E_{tot} = E_{kin} + E_{pot}$
4. Komponenten des Drucktensors  $\mathbf{P}$

Stellen Sie diese Werte für  $t \in [0, 5]$  graphisch dar. Wählen Sie für  $\delta t = 10^{-3}$ .

Hinweis:

Geschwindigkeits-Verlet-Zeitschritt:

- $\mathbf{r}_j(t + \delta t) = \mathbf{r}_j(t) + \mathbf{v}_j(t)\delta t + \mathbf{F}_j(t)\delta t^2/2$
- $\mathbf{F}_j(t) = - \sum_{k \neq j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{jk}} \phi(r_{jk})$
- $\mathbf{v}_j(t + \delta t) = \mathbf{v}_j(t) + [\mathbf{F}_j(t) - \mathbf{F}_j(t + \delta t)]\delta t/2$

- 
- Vorlesung: Mi 10<sup>15</sup> - 11<sup>45</sup> Uhr, EW 731 Do 14<sup>15</sup> - 15<sup>45</sup> Uhr, EW 184  
Tutorien: Mo 14<sup>15</sup> - 15<sup>45</sup> Uhr, EW 184

- **Kontakt, Inhalte, Übungsblätter etc.:** <http://www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ws0708/wpfv/statii/>

- **Scheinkriterien:**

Mindestens 50 Prozent der Übungspunkte und aktive Teilnahme am Tutorium.

Mit diesem Übungsschein sind die Übungen im Fach Statistische Physik I und II abgegolten.

- **Sprechstunde:** S. Heidenreich im EW 702, jeder Zeit