

a)

Die Teilchen werden so in der Box platziert, dass der Abstand zu allen nächsten Nachbarn (inklusive der periodischen Randbedingungen) gleich groß ist für alle Teilchen.

b)

Die Temperatur wird berechnet gemäß

$$T(t) = \frac{2E_{\text{kin}}(t)}{k_B(2N - 2)}.$$

Die kinetische Energie ist gegeben durch

$$E_{\text{kin}} = \sum_i \left\langle \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \right\rangle$$

und *die* potentielle Energie ist

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \langle V(\vec{r}_{ij}) \rangle$$

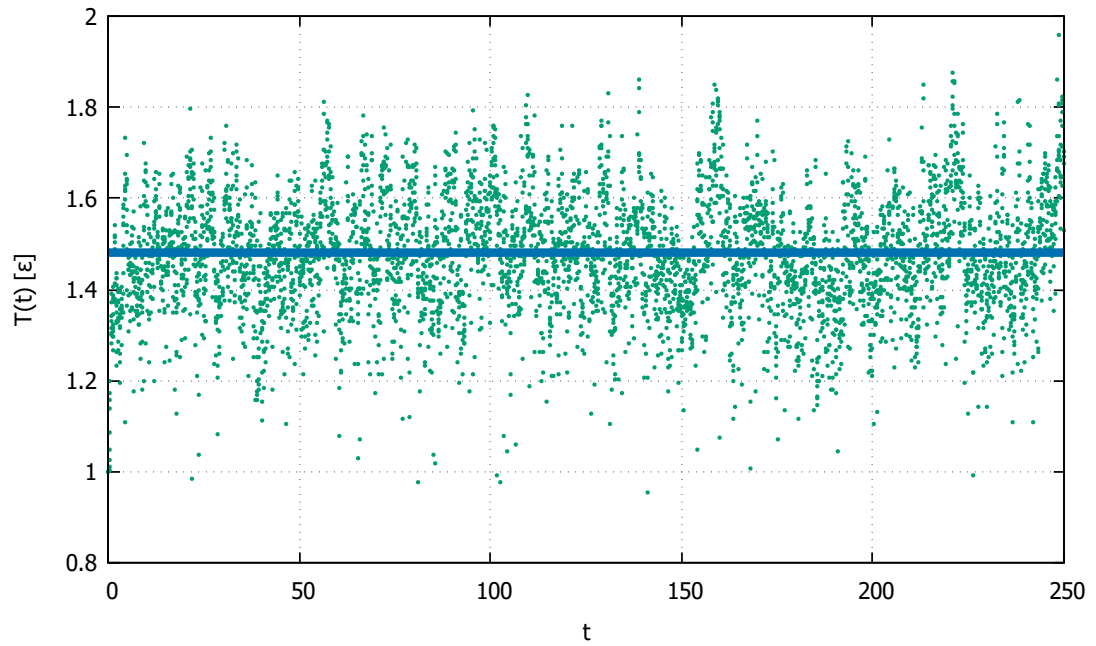


Abbildung 1: Darstellung des zeitlichen Verlaufs der Temperatur. Nach etwa 30 Zeitschritten pendelt sich die Temperatur auf einen Wert zwischen 1.2ε und 1.8ε ein. Starttemperatur ist $T_0 = 1\varepsilon$.

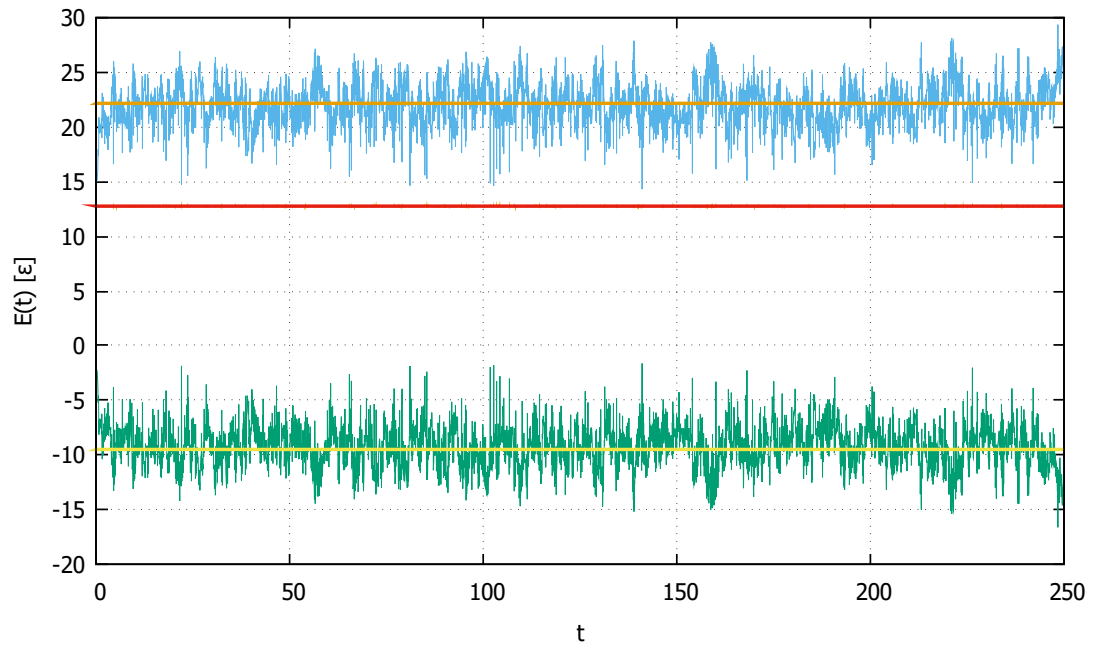


Abbildung 2: Darstellung des zeitlichen Verlaufs der kinetischen, potentiellen und der Gesamtenergie. Für sehr kleine Zeiten ist ein starker Anstieg der kinetischen und ein starker Abfall der potentiellen Energie zu erkennen (das System setzt sich in Bewegung). Anschließend folgt eine Art „Einschwingvorgang“, bei dem das System zunehmend seinen Anfangszustand vergisst. Die Äquilibration ist nach etwa 30 Zeitschritten abgeschlossen. Ab diesem Zeitpunkt schwanken kinetische und potentielle Energie um ein gewisses, gleichbleibendes Niveau. Die Gesamtenergie ist über den Simulationszeitraum erhalten.

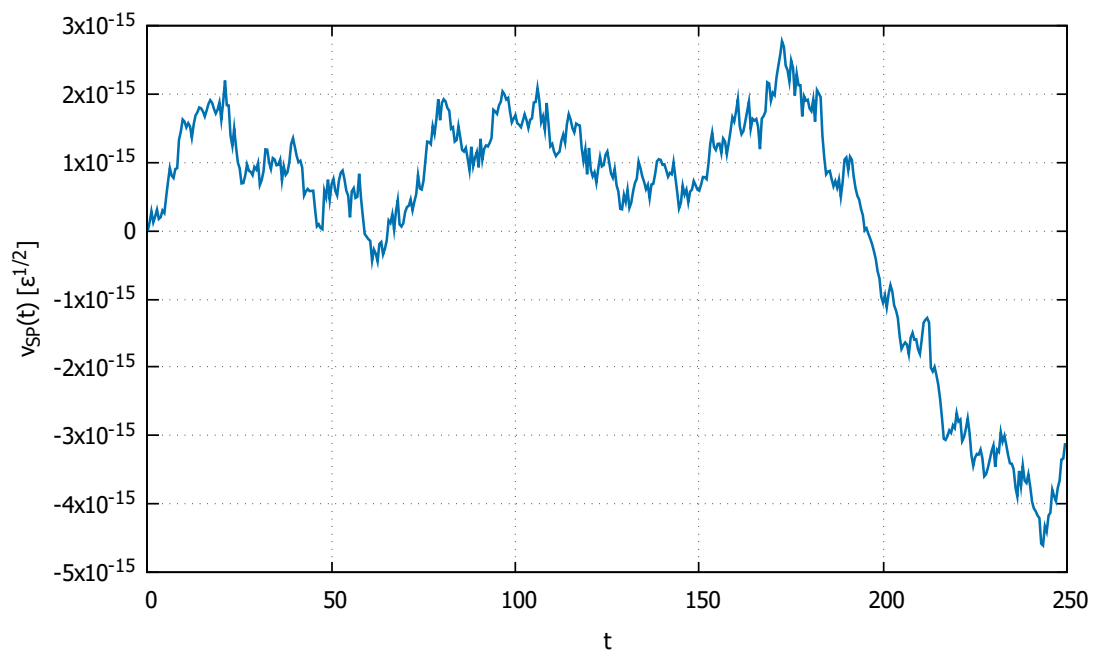


Abbildung 3: Zeitlicher Verlauf der Schwerpunktsgeschwindigkeit $v_{\text{SP}}(t)$ der Teilchen. Nachdem $v_{\text{SP}}(t)$ zu Beginn der Simulation auf den Wert Null gesetzt wurde, schwankt der Wert nur noch durch numerisches Rauschen in der Größenordnung $\sim 10^{-15}$.

c)

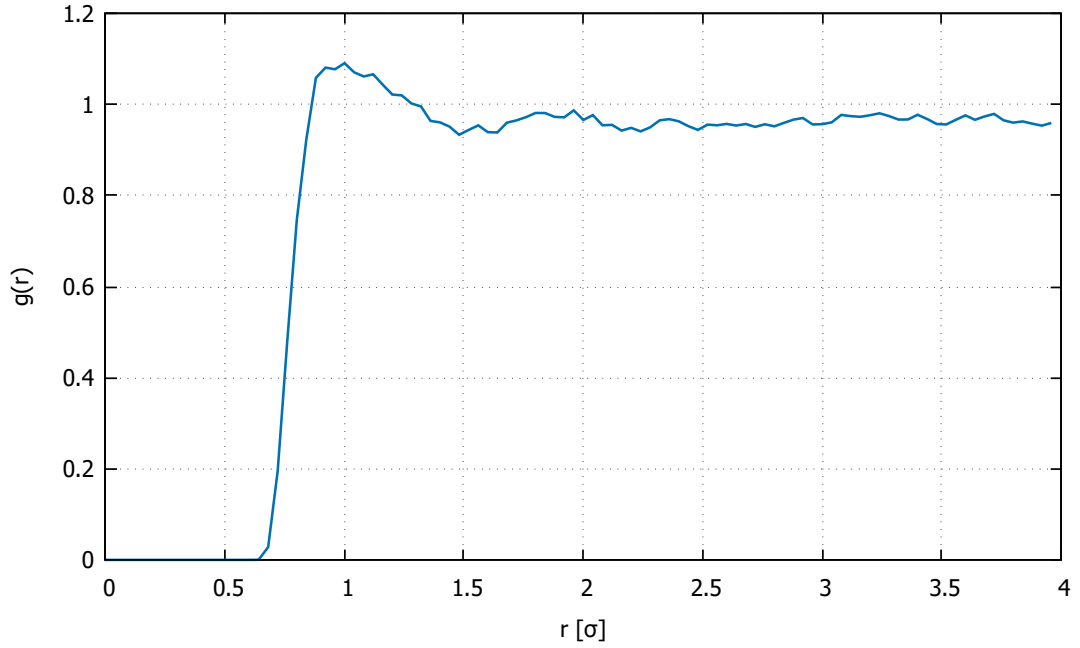


Abbildung 4: Paarkorrelationsfunktion für eine Starttemperatur $T_0 = 100 \varepsilon$. Es liegt eine Gasphase vor. Bei einem Radius $r > 1.5 \sigma$ liegt bereits so gut wie keine Korrelation mehr zwischen den Teilchen vor ($g(r) \approx 1$). Das Maximum $r \approx 1 \sigma$ stellt den wahrscheinlichsten Teilchenabstand dar. Es ist zudem (annähernd, eigentlich $r = 1.12 \sigma$) gerade das Minimum des Leonard-Jones-Potentials. Dass gerade dort der wahrscheinlichste Abstand liegt, ist typisch für Gasphasen und insbesondere für sehr kleine Dichten (ein nahezu ideales Gas) sogar exakt. Stellt man sich vor, das System bestehe nur aus zwei Teilchen, von denen sich eines im Ursprung fixiert befindet, dann verhält sich das andere Teilchen Boltzmann-verteilt. Da sich das System nur aus diesen beiden Teilchen zusammensetzt, entspricht dann gerade die Paarverteilung der Boltzmann-Verteilung $g(r) \approx e^{-V(r)/k_B T}$. Diese Funktion wird an der Stelle maximiert, an der $V(r)$ minimiert wird.

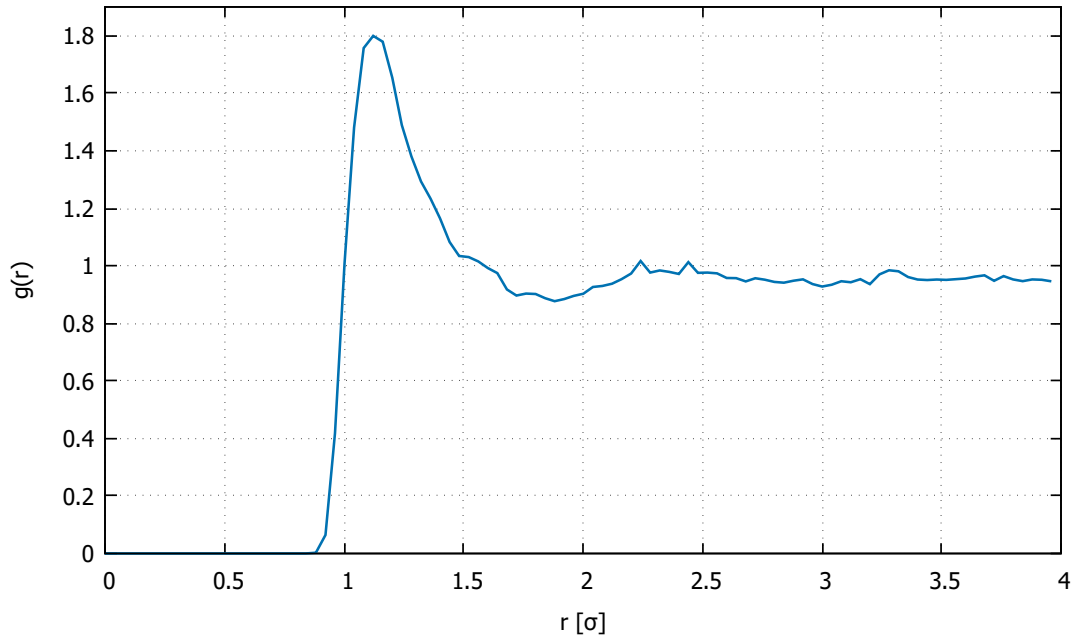


Abbildung 5: Paarkorrelationsfunktion für eine Starttemperatur $T_0 = 1 \varepsilon$. Es liegt eine Flüssigphase vor. Die Paarkorrelationsfunktion hat das Hauptmaximum dort, wo das Potential minimiert wird ($r = 1.12 \sigma$). Zusätzlich finden sich lokale, weniger ausgeprägte Maxima bei Vielfachen des wahrscheinlichsten Teilchenabstands. Die Ausprägung der Maxima fällt schnell ab, oszillierend annähernd um den Wert Eins.

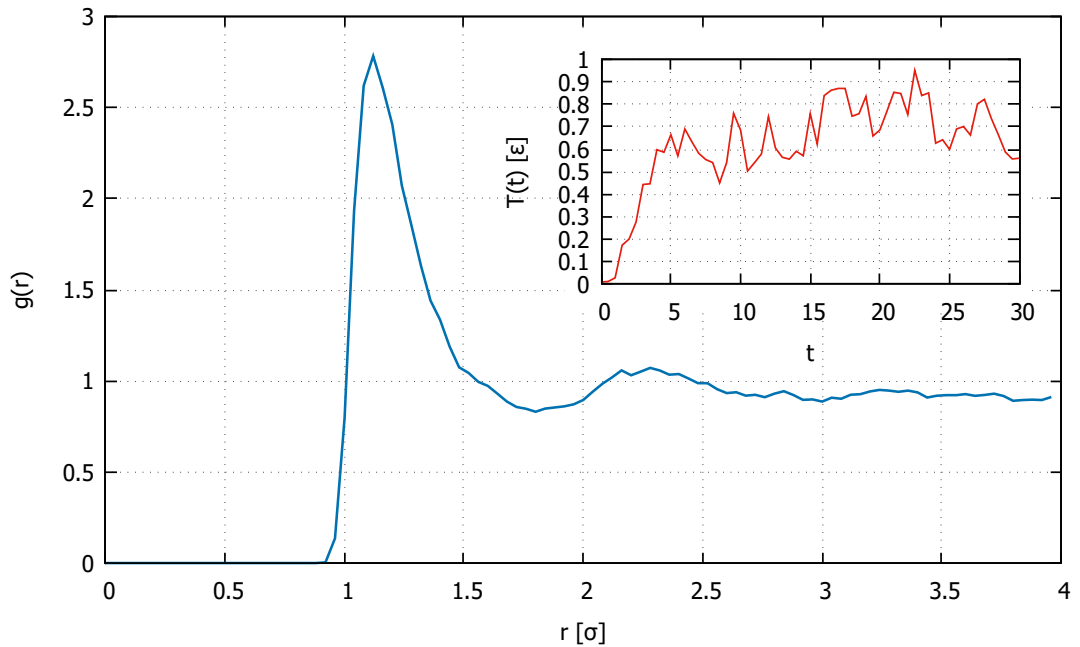


Abbildung 6: Paarkorrelationsfunktion für eine Starttemperatur $T_0 = 0.01 \varepsilon$. Es liegt erneut eine Flüssigphase vor. Die Temperatur steigt in den ersten Zeitschritten bereits auf einen Wert $T = 0.7 \varepsilon$ an, weswegen ohne Thermostat eine Festphase nicht beobachtet werden kann.

d)

Zusätzlich zu den Momentaufnahmen der Festphase ist eine .gif-Datei in der Abgabe enthalten, die die Dynamik des Systems darstellt.

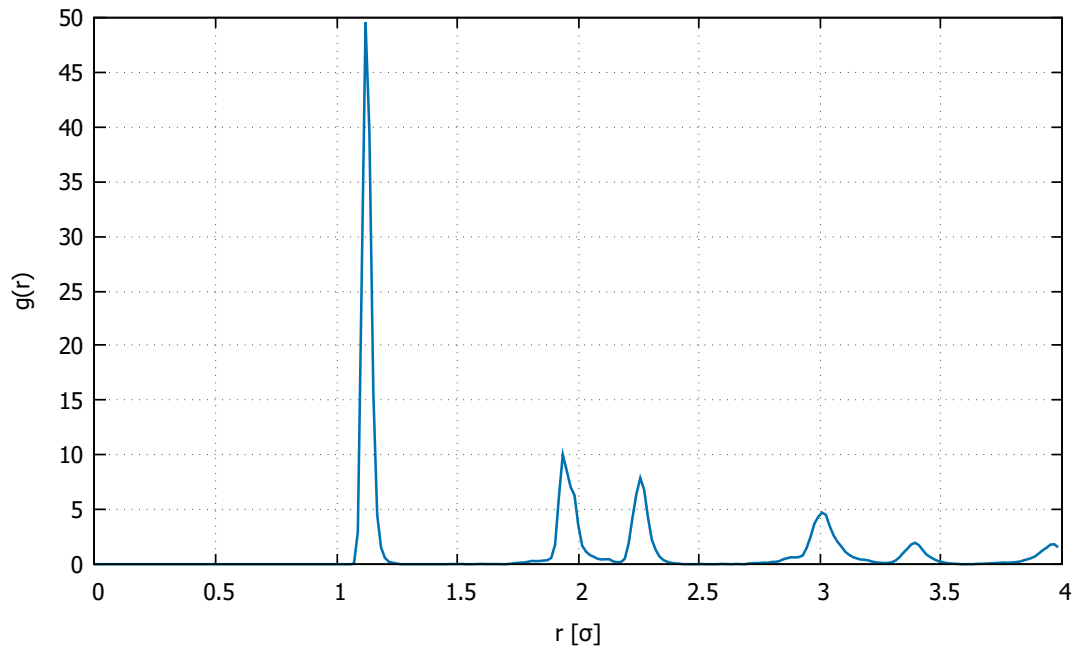


Abbildung 7: Paarkorrelationsfunktion für eine Starttemperatur $T_0 = 0.01 \varepsilon$ mit isokinetischem Thermostat. Dadurch, dass die Temperatur in jedem Zeitschritt reskaliert wird, liegt nun eine Festphase vor.

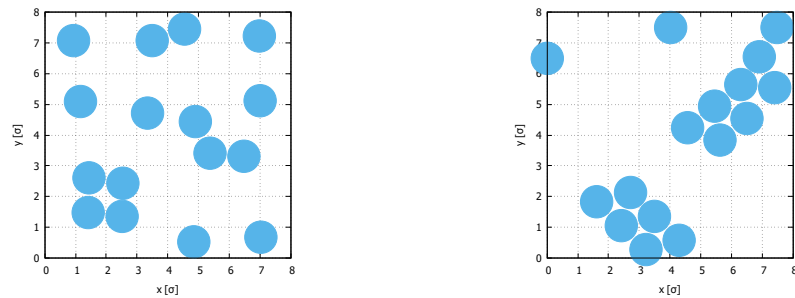


Abbildung 8: Momentaufnahme des Systems zu Beginn der Simulation und eine Momentaufnahme zu einem späteren Zeitpunkt. Die Festphase ist nun erkennbar.