

Computersimulationen von Vielteilchensystemen

Projekt 3: *Monte Carlo Simulation: Lennard-Jones-Gas im N, V, T -Ensemble*

Aufgabe:

1. Schreiben Sie ein Programm, welches ein Lennard-Jones-Gas im NVT-Ensemble mittels der "off-lattice" Monte Carlo Methode simuliert.
2. Schreiben Sie weiterhin eine Sampleroutine, welche mittlere Energie $\langle U \rangle_{N,V,T}$ und Druck p berechnet.
3. Schreiben Sie ein Programm, welches die Paarverteilungsfunktion $g(r)$ als Mittel über mehrere Konfigurationen nähert.

Literatur:

David P. Landau, Kurt Binder: *A Guide To Monte Carlo Simulations In Statistical Physics*. Cambridge University Press (2005).
Kapitel 6 Seite 194-197