

Moleküldynamik: Beispiel Argonkristall

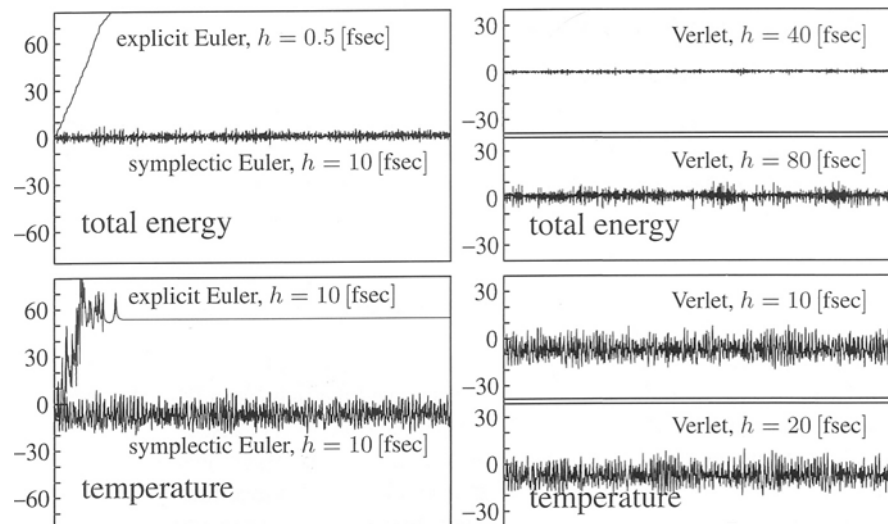
Literatur:

E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner: Geometrical Numerical Integration. Springer 2002.

atom	1	2	3	4	5	6	7
position	0.00 0.00	0.02 0.39	0.34 0.17	0.36 -0.21	-0.02 -0.40	-0.35 -0.16	-0.31 0.21
velocity	-30 -20	50 -90	-70 -60	90 40	80 90	-40 100	-80 -60

Anfangswerte in nm, nm/s

© Hairer, Lubich, Wanner 2002



© Hairer, Lubich, Wanner 2002

Makroskopische Größen

- Gesamtenergie
- Temperatur

