



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 7, 17.06.2009

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Linux Chemie-Computer-Labor

Aufgabe 9: Leapfrog Algorithmus

Beim Leapfrog Algorithmus ("Froschhüpfen") zur Berechnung von Trajektorien werden die Geschwindigkeiten \mathbf{V} und die Orte \mathbf{R} sukzessiv berechnet durch

$$\mathbf{V}(t + \frac{\Delta t}{2}) = \mathbf{V}(t - \frac{\Delta t}{2}) - \left(\frac{\nabla \mathbf{R}}{M} \right)_t \Delta t + \dots \quad (1)$$

$$\mathbf{R}(t + \Delta t) = \mathbf{R}(t) + \mathbf{V}(t + \frac{\Delta t}{2}) \Delta t + \dots \quad (2)$$

Leiten Sie den Leapfrog Algorithmus her.

Hinweis: Benutzen Sie Taylorentwicklungen der Geschwindigkeit \mathbf{V} und des Ortes \mathbf{R} in der Zeit t .

Aufgabe 10: Visualisierung von Molekulardynamiksimulationen

Ein wichtiger Teil von Computersimulationen ist die Visualisierung der Ergebnisse. Im Linux Chemie-Computer-Labor ist die freie Graphik-Software `vmd` (*Visual Molecular Dynamics*) installiert, die man mit den zwei Befehlen

```
option vmd
```

```
vmd
```

starten kann.

Diese Software kann kostenfrei heruntergeladen werden von

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

ein Tutorial befindet sich bei

<http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/vmd/tutorial-html/index.html>

In dieser Aufgabe sollen Sie im Linux Chemie-Computer-Labor unter Anleitung die Visualisierung einer berechneten MD-Trajektorie üben. Laden Sie dazu von der Webpage

http://www.uni-ulm.de/theochem/lehre/SS2009/ModSim_Uebungen

auf der sich auch ein Link zu der `vmd` Homepage befindetet, die beiden Dateien `VASP_XDATCAR` und `VASP_POSCAR` herunter, die mit dem Programmpaket `VASP` erzeugt wurden und eine Simulation von zwei Lagen Wasser auf einer Silberoberfläche bei Raumtemperatur über 13,7 ps mit einem Zeitschritt von 1 fs enthalten.

Zunächst sollen Sie in `vmd` die Datei `VASP_POSCAR` über `File -> New Molecule ...` laden, wobei Sie dabei `VASP_POSCAR` als `file type` angeben müssen. Die Trajektorie befindet sich in der Datei `VASP_XDATCAR` (Größe 44 MB). Verfolgen Sie, wie sich die anfangs geordnete Wasserstruktur als Funktion der Zeit auflöst.