



## Theoretische Modellierung und Simulation

### Übungsblatt Nr. 8, 06.06.2012

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Linux Chemie-Computer-Labor, O26/198, am Freitag, den 15.06.2012

---

#### Aufgabe 12: Leapfrog Algorithmus

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

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

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

Leiten Sie den Leapfrog Algorithmus her.

**Hinweis:** Benutzen Sie Taylorentwicklungen der Geschwindigkeit  $\mathbf{V}$  für  $(t + \frac{\Delta t}{2})$  und  $(t - \frac{\Delta t}{2})$  um den Zeitpunkt  $t$  und des Ortes  $\mathbf{R}$  für  $(t + \Delta t)$  und  $(t)$  um den Zeitpunkt  $(t + \frac{\Delta t}{2})$ .

#### Aufgabe 13: Visualisierung von Molekulardynamiksimulationen

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

```
module load vis/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/nawi/nawi-theochemie/lehre/lehre-ss-2011/simulation-und-modelling-ss2011.html>

auf der sich auch ein Link zu der *vmd* Homepage befindet, die beiden Dateien *XDATCAR\_H2O\_Ag.zip* und *POSCAR* herunter, die mit dem Programmpaket VASP erzeugt wurden und eine Simulation von zwei Lagen Wasser auf einer Silberoberfläche bei Raumtemperatur über mehrere Pikosekunden mit einem Zeitschritt von 1 fs enthalten.

Zunächst sollen Sie in *vmd* die Datei *POSCAR* über **File -> New Molecule ...** laden, wobei Sie dabei *VASP\_POSCAR* als *file type* angeben müssen. Über das Menu **Graphics -> Representations ...** können Sie die Ansicht der Struktur verändern. Entpacken Sie dann die Datei *XDATCAR\_H2O\_Ag.zip* mit dem Befehl `unzip XDATCAR_H2O_Ag.zip`. In der Datei *XDATCAR\_H2O\_Ag* befindet sich die Trajektorie (Größe 17 MB). Laden Sie diese Datei auch in *vmd*, wobei Sie jetzt *VASP\_XDATCAR* als *file type* angeben müssen. Verfolgen Sie, wie sich die anfangs geordnete Wasserstruktur als Funktion der Zeit auflöst.

