



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 8, 18.06.2014

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Chemie-Computer-Labor, O26/198, am Mittwoch, den 25.06.2014.

Aufgabe 14: 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 15: 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. Befehlen

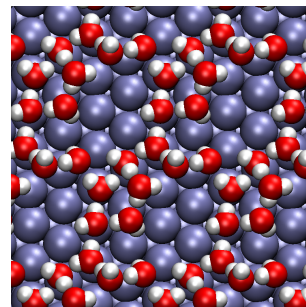
Diese Software kann kostenfrei heruntergeladen werden von

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

ein Tutorial befindet sich bei

<http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/vmd/>

[tutorial-html/index.html](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-2014/](http://www.uni-ulm.de/nawi/nawi-theochemie/lehre/lehre-ss-2014/simulation-und-modelling-ss2014.html)

[simulation-und-modelling-ss2014.html](http://www.uni-ulm.de/nawi/nawi-theochemie/lehre/lehre-ss-2014/simulation-und-modelling-ss2014.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 Menü *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.