

Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 6, 23.05.2018

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 Freitag, dem 01.06.2018, 12 bis 14 Uhr

Aufgabe 12: Monte-Carlo Integration

Schreiben Sie ein kleines Python Programm um das Integral

$$f(x) = \int_0^1 (x^2 + x) dx \quad (1)$$

mittels Monte-Carlo Integration zu berechnen.

Aufgabe 13: Molekulardynamiksimulationen

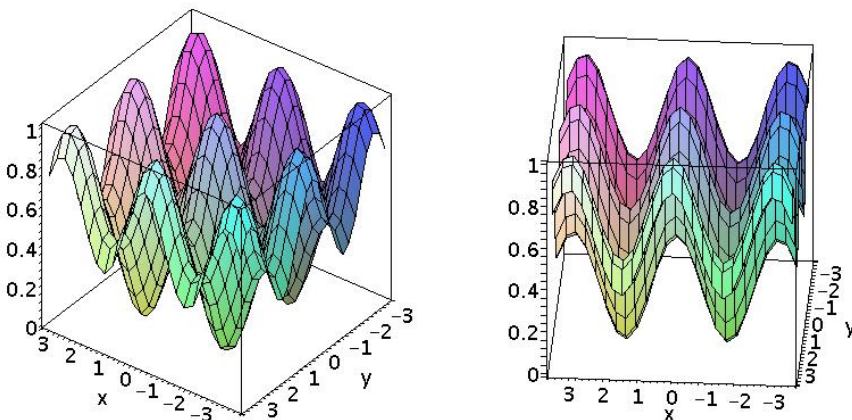
Molekulardynamik (MD) bezeichnet Computersimulationen, bei denen Wechselwirkungen zwischen Atomen und Molekülen semiempirisch anhand von Kraftfeldern berechnet und die zeitliche Entwicklung mit Hilfe von Bewegungsgleichungen über einen gewissen Zeitraum numerisch dargestellt werden.

Zur Übung sollen Sie die Diffusion eines Teilchens auf einer Oberfläche behandeln, wobei das Potential gegeben ist durch

$$V(x, y) = \frac{1}{4}V_0(2 + \cos(\frac{2\pi}{a}x) + \cos(\frac{2\pi}{a}y)) \quad (2)$$

mit $a = 3 \text{ \AA}$ und $V_0 = 1 \text{ eV}$.

Hier sehen Sie zwei unterschiedliche Ansichten des Potentials:



Laden Sie dazu von der Webpage der Vorlesung

<http://www.uni-ulm.de/nawi/nawi-theochemie/lehre/lehre-ss-2016/theoretische-modellierung-und-simulation.html>

das PYTHON Programm `Verlet_MD_python.py` herunter.

Bitte wenden!

Dieses Programm benutzt den Verlet-Algorithmus zur Lösung der Bewegungsgleichungen, der gegeben ist durch

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t) + \Delta t^2 \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m} + O(\Delta t^4), \quad (3)$$

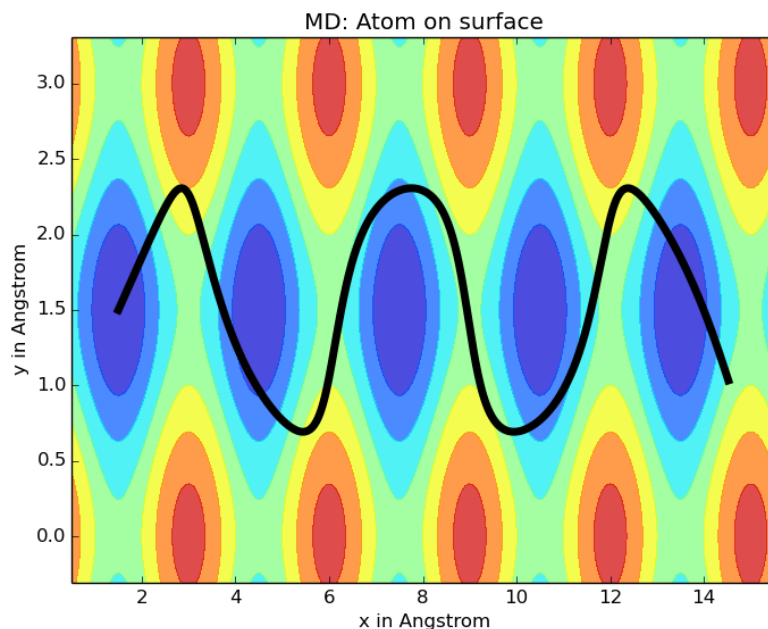
wobei \mathbf{r}_i die Trajektorie des i -ten Teilchen ist, Δt der Zeitschritt und $\mathbf{F}_i = -\nabla_i V$ die auf das i -te Teilchen wirkende Kraft. Beachten Sie, dass die Geschwindigkeit nicht explizit im Algorithmus auftaucht. Sie kann abgeschätzt werden durch

$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{\mathbf{r}_i(t + \Delta t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t)}{2\Delta t}. \quad (4)$$

Berechnen Sie verschiedene Trajektorien, in dem Sie im Programm die kinetische Energie $0 < E_{\text{kin}} < 1$ eV, den Anfangswinkel in Grad und die Anzahl der Zeitschritte angeben. Die Teilchen starten dabei am Potentialminimum.

Öffnen Sie das Programm in einem Texteditor und schauen Sie sich die Implementierung an.

Die Trajektorie wird automatisch geplottet.



Welche Einhüllende der Trajektorien ergeben sich? Wann erhalten Sie eine Trajektorie, die auf eine Einheitszelle beschränkt ist, und wann erhalten Sie ein in eine Richtung propagierendes Teilchen?

Verändern Sie das Programm entsprechend, dass anstatt der 2D Trajektorie des Teilchens die zeitliche Entwicklung der Energien, d.h. Gesamtenergie, kinetische und potentielle Energie gezeichnet wird.

Wie verhält sich die Gesamtenergie (= Summe aus kinetischer und potentieller Energie) als Funktion der Laufzeit?