



## Theoretische Modellierung und Simulation Übungsblatt Nr. 7, 30.05.2018

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 Donnerstag, dem 07.06.2018, und am Freitag, dem 08.06.2018, jeweils 12 bis 14 Uhr

---

### 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

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

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

Leiten Sie den Leapfrog Algorithmus her.

**Hinweis:** Benutzen Sie Taylorentwicklungen der Geschwindigkeit  $\mathbf{V}$  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

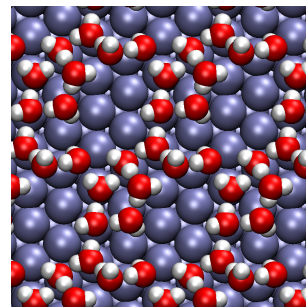
Ein wichtiger Teil von Computersimulationen ist die Visualisierung der Ergebnisse (siehe untenstehende Illustration). Im Linux Chemie-Computer-Labor ist die freie Graphik-Software *vmd* (*Visual Molecular Dynamics*) installiert.

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 der Vorlesung

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

auf der sich auch ein Link zu der *vmd* Homepage befindetet, 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.