

1)

a) src: modules/metropolis.f90

b) Die Akzeptanzrate beträgt ~50% bei $\Delta = 0.005 \text{ nm}$ (data/au13-300.xyz.zip). Sie sollte ~50% sein, da wenn sie kleiner ist viele Schritte verworfen werden (= unnötige Arbeit) und wenn sie größer ist beschränkt sich die Auswertung auf die Täler und es kommt lediglich zu geringen Energieänderungen.

c) $\Delta = 0.012 \text{ nm}$ (data/au13-2000.xyz.zip). 300K => fest. 2000K => flüssig.
plot: plot.pdf

PS: