

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. In plot.pdf (data/c.dat) sieht man, dass trotz steigender Energie bei ~440-460 K kaum ein Anstieg der Temperatur folgt. Die Energie wird zum Ändern des Aggregatzustands verwendet. Insofern ist der Schmelzpunkt diese Temperatur.