

1)

a) src: modules/verlet.f90 verlet_step

Umrechnung von Angström zu Bohrradius => Faktor von ca. 2

Die VMD Datei ist data/CO_xxx_verlet_dt20_r2.25000000.xyz , wobei cms für die Simulation im Schwerpunktsystem und lab für das Laborsystem steht.

b)

Im Ordner images/ sind R und E gegen t, unter Variation des Bezugssystems, Startabstands $R(0)$, Zeitschritte dt und Algorithmus (simple/corrected euler und verlet), aufgetragen.

Die Frequenz in 1/a.u. lässt sich mit α/a_0 also Feinstrukturkonstante und Bohrradius in 1/cm Umrechnen.

Die Schwingungsfrequenz k nimmt mit dem Startradius ab.

$R(0)=2.3 \Rightarrow k=2210 \text{ 1/cm}$

$R(0)=2.5 \Rightarrow k=2072 \text{ 1/cm}$

$R(0)=3.0 \Rightarrow k=1796 \text{ 1/cm}$

Der Trend ergibt sich daraus, dass mit größerem Abstand mehr Gesamtenergie erhalten ist und dass das Potential nicht dem eines Harmonischen Oszillators entspricht, für welchen die Frequenz unabhängig von der Energie wäre.

Außerdem schwankt die Gesamtenergie weniger bei geringerem Startabstand.

Der exp. Literaturwert der Schwingungsfrequenz beträgt $k = 2169.8 \text{ 1/cm}$ und ist damit am nächsten zu $R(0)=2.3$.

c) $R(0)=2.3$

Beim korrigierten Euler-Algorithmus nimmt die Energie scheinbar exponentiell ab.

Beim Verlet-Algorithmus schwankt sie dagegen nur ein bisschen in einer hinteren Nachkommastelle.

Bei einer Schrittweite von $dt=100$ sind fast keine Oszillationen beim Euler Algorithmus mehr erkennbar.

(CO_xxx_corrected_euler_dt100_r2.99999995.pdf).

Der Verlet Algorithmus dagegen liefert nach wie vor ein k von ca 2200 1/cm, jedoch schwankt die Energie deutlicher.

Der Verlet-Algorithmus liefert also bessere Ergebnisse.

Bei einem $dt=100$ ist $R(t)$ mit dem Verlet-Algorithmus ziemlich sprunghaft, weshalb eine obere Schranke von ca. $dt=40$ sinnvoll ist für glatte Funktionen.

Allerdings lässt sich auch mit $dt=100$ immer noch ziemlich gut die Schwingungsfrequenz bestimmen.