

---

## Aufgabe 1

4.07.2019

---

**Ziel:** Entwurf und Umsetzung eines Molekulardynamikprogramms:

Verwenden Sie module, Unterfunktionen/Routinen, dynamische Speicherverwaltung, Makefile

*Entwerfen Sie einen Programmablauf, um die Struktur des Programms festzulegen !*

Schreiben Sie ein Programm zur Berechnung der Bewegung einer gegebenen Anzahl  $N$  von Punkten. Dazu soll eine Bewegungsgleichung 2ter Ordnung verwendet werden.

Eingabe:

- (i) Einlesen einer Ausgangskonfiguration: definieren Sie sich hierzu ein geeignetes Dateiformat (z.B. es sollte die Anzahl der Teilchen, Masse, sowie Ort und Geschwindigkeit vorgegeben werden können)
- (ii) Einlesen der Parameter (für Kraftgesetz, Zeitschritt,...)

Berechnungen:

In jedem Zeitschritt müssen die folgenden Aufgaben durchgeführt werden

1. Berechnung der auf die Massenpunkte wirkenden Kräfte
2. Integration der Bewegungsgleichungen:  $N$  Newtonschen Gleichungen; Zeitschritt  $dt$ ; Gesamtzeit wird um  $dt$  erhöht.
  1. Euler Verfahren
  2. Verlet Verfahren
3. Berechnung der Observablen: z.B. Gesamtenergie des Systems, mittlere Geschwindigkeit von Teilchen, Ausgabe der Positionen in Datei
4. Abbruchbedingung testen: weiter bei (1) oder Ende des Programms

Berechnen Sie die Planetenbewegung des auf Seite 208 beschriebenen Systems (4 „Teilchen“)

(Beschreibung des MD Verfahrens in den Vorlesungsfolien)

## Aufgabe 2:

Erweiterung für Vielteilchensimulation mit kurzreichweitiger Wechselwirkung:

- implementieren Sie den linked cell Algorithmus (Vorlesungsfolien)
- Schreiben Sie einen Programm, welches Atome auf Gitterplätzen verteilt:
  - Quadratgitter
  - hexagonales Gitter(Gitterkonstante:  $a=1$ )

MD-Simulation mit Lennard-Jones(LJ) Potenzial:

1. Berechnen Sie analytisch den Gleichgewichtsabstand  $r_0$  für zwei Teilchen, deren Wechselwirkung mit dem LJ Potenzial beschrieben werden kann:

$$U(r_{ij}) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right)$$

2. Berechnen Sie den mittleren Gleichgewichtsabstand für ein System mit  $N=100$  Teilchen, die sich auf einem Quadratgitter mit  $10 \times 10$  Plätzen befinden. Variieren Sie hierzu den Gitterabstand  $a$  um  $\pm 10\%$  um den in (1) bestimmten Gleichgewichtsabstand und tragen sie die potenzielle Energie des Systems gegen den Gitterabstand  $a$  auf.