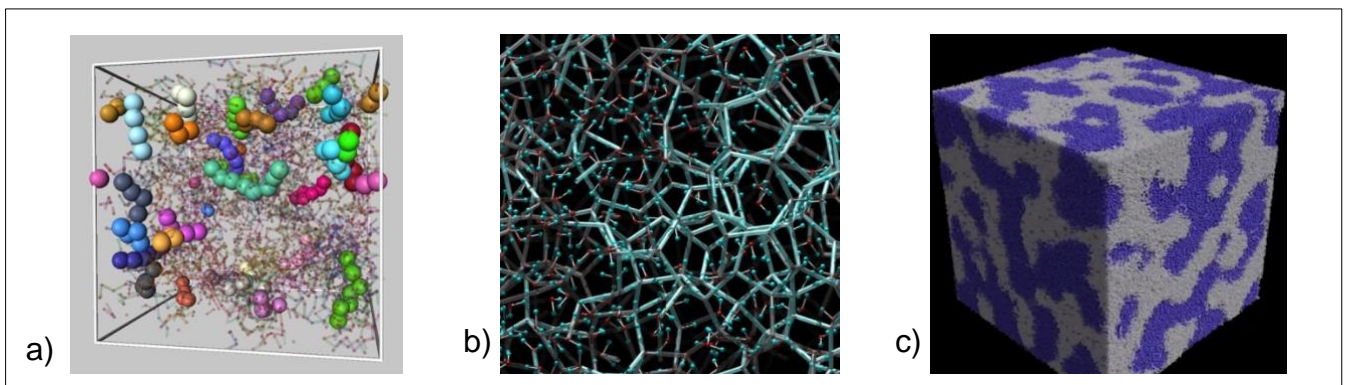


## Molekulardynamik-Simulation

**Beschreibung** Um zu verstehen, wie die atomare Struktur von natürlichen und künstlichen Materialien sowie von biologischen Systemen mit ihren Eigenschaften und Funktionen zusammenhängt, ist es notwendig zu verstehen, wie die Atome und Moleküle im Raum interagieren und sich bewegen. Die Molekulardynamik stellt einen mathematischen Algorithmus und daher ein virtuelles Mikroskop zur Verfügung, um die Bewegung von Atomen und Molekülen zu simulieren, um Eigenschaften komplexer Systeme mit einem Computer zu untersuchen und vorherzusagen.

**Beispiele für Molekulardynamik-Simulationen** Zu den zahlreichen Erfolgsgeschichten der molekularen Dynamik gehören vorhersagekräftige Simulationen von künstlichen und biologischen Polymeren, wie zum Beispiel von Kunststoffen, Proteinen und DNS, wobei direkt im Labor messbare Eigenschaften aus den statistischen Verteilungen, die uns Simulationsdaten der Molekulardynamik liefert, berechnet werden können.



a) Polymer Glass Simulation Courtesy: National Institute of Standards and Technology  
[http://www.publicdomainfiles.com/show\\_file.php?id=13974385214058](http://www.publicdomainfiles.com/show_file.php?id=13974385214058)

b) Gefrieren von Wasser Courtesy: Masakazu Matsumoto <https://www.flickr.com/photos/vitroids/2647573395>

c) Phasentrennung in Polymermischung von P3HT und PCBM Courtesy: Oak Ridge Leadership Computing Facility (OLCF) <https://vimeo.com/73709443>

### Lernziele

- Molekulare Modellierung und Molekulardynamik-Modellrechnung
- Datenanalyse und Interpretation der Ergebnisse
- Wissenschaftliche Online-Literaturrecherche

## Aufgaben

- Entwicklung eines einfachen Molekulardynamik-Simulationscodes:  
Programmieren mit Python
- Durchführung von Simulationen für ausgewählte Materialbausteine: Beginn mit Argon-Gas, dann molekulare Systeme
- Diskussion und Präsentation der Ergebnisse