



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 2, 27.04.2011

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Linux Chemie-Computer-Labor

Aufgabe 3: Lennard-Jones Potential

Das Lennard-Jones 12-6 Paarpotential kann auf zwei verschiedene Weisen geschrieben werden

$$U_{L-J} = \left(\frac{C_{AB}^{12}}{R_{AB}^{12}} - \frac{C_{AB}^6}{R_{AB}^6} \right) \quad (1)$$

$$= 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right) \quad (2)$$

a) Zeigen Sie, dass U_{L-J} bei $R = 2^{1/6}\sigma$ einen stationären Punkt hat, d.h., dass dort die erste Ableitung des Potentials verschwindet. Zeigen Sie auch, dass der stationäre Punkt ein Minimum ist.

b) Die Argon-Argon Wechselwirkung wird durch $\epsilon/k_B = 124 \text{ K}$ und $\sigma = 342 \text{ pm}$ beschrieben. Plotten Sie das Potential.

Aufgabe 4: Bindungsenergie

Betrachte die folgende lineare Anordnung von fünf Argon Atomen:



Die Gesamtenergie des Systems sei durch eine Summe von Paarwechselwirkungen gegeben, wobei die Potentialenergie der Atome i und j als U_{ij} geschrieben sei. Bestimmen Sie die Gesamtenergie des Systems, wenn das Atom A im Unendlichen ist, d.h. wenn die Wechselwirkung des Atoms A mit den anderen Atomen verschwindet.

Die Bindungsenergie ϵ_A eines Teilchens in einem System ist definiert als die Differenz der Energien für das Teilchen in seiner Bindungsposition und in unendlicher Entfernung. Zeigen Sie, dass die Bindungsenergie von A gegeben wird durch

$$\epsilon_A = U_{1A} + U_{2A} + U_{3A} + U_{4A} . \quad (3)$$