



## Theoretische Modellierung und Simulation

### Übungsblatt Nr. 2, 25.04.2012

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Linux Chemie-Computer-Labor, O26/198, am Freitag, den 04.05.2012.

---

#### Aufgabe 3: Lennard-Jones Potential

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

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

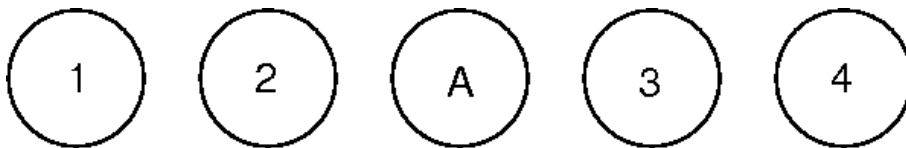
$$= 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right) \quad (2)$$

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

Betrachten Sie 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  $\epsilon_A$  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

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