



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 2, 07.05.2014

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 Mittwoch, den 14.05.2014

Aufgabe 4: Lennard-Jones Potential

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

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

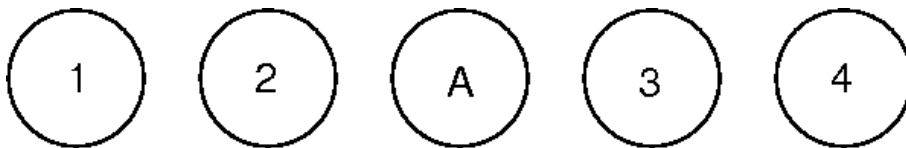
$$= 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right) \quad (2)$$

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 5: 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.

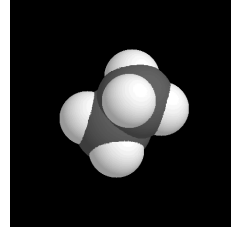
Die Bindungsenergie ϵ_A eines Teilchens in einem System ist definiert als die Differenz der Energien für das Teilchen in seiner Bindungsposition und in unendlicher Entfernung. Zeigen Sie, dass die Bindungsenergie von A gegeben wird durch

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

Bitte wenden!

Aufgabe 6: Molekularmechanik

a) Berechnen Sie mit Hilfe der beiden Kraftfelder UFF und Dreiding die Gesamtenergie von Ethan (C_2H_6) in der optimierten Struktur, d.h. in der Struktur mit der minimalen Gesamtenergie. Führen Sie die Rechnungen, falls möglich, sowohl mit *GAUSSIAN* als auch mit *Materials Studio* durch. Gibt es Unterschiede? Was besagt diese Gesamtenergie?



b) Berechnen Sie die Energie des Ethan-Moleküls als Funktion des Diederwinkels mit beiden Kraftfeldern. Wie groß ist der Unterschied der Energie in der ekliptischen und der gestaffelten Konformation?

