



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 5, 28.05.2014

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Chemie-Computer-Labor, O26/198, am Mittwoch, den 04.06.2014.

Aufgabe 9: Geometrieoptimierung bei mehreren lokalen Minima

Die Potentialhyperfläche eines Systems kann mehrere Minima besitzen, d.h. es kann mehrere (meta-)stabile Strukturen mit ähnlicher Energie geben. Eine Geometrieoptimierung liefert im Allgemeinen nur ein *lokales* Minimum. Um das globale Minimum zu finden, müssten verschiedene lokale Minima berechnet und miteinander verglichen werden.

Sehr effektiv kann man dies mittels einer *Quench Molecular Dynamics* Simulation (QMD, "Abschreckmolekulardynamik") erreichen. Dabei handelt es sich um eine Molekulardynamik-Simulation, bei der nach bestimmten Zeitschritten zusätzlich eine Geometrieoptimierung durchgeführt wird.

Am Beispiel der Adsorption von ortho-Chlorophenol auf TiO_2 soll dies mit Hilfe einer COMPASS-Kraftfeld-Rechnung gezeigt werden (siehe Materials Studio: Help → Tutorials → Forcite Plus Tutorials → Finding low energy configurations of a molecule on a surface").

Führen Sie dazu folgende Schritte aus:

- Optimieren Sie o-Chlorophenol. Benutzen Sie das Modul "Conformers", um unterschiedliche Rotamere von o-Chlorophenol in der Gasphase zu berechnen und bestimmen Sie das energetisch günstigste Konformer.
- Optimieren Sie den TiO_2 -Rutil-Kristall. Schneiden Sie eine (110)-Oberfläche aus. Optimieren Sie diese Oberfläche.
- Optimieren Sie die Oberfläche mit dem adsorbierten Molekül.
- Führen Sie eine "Quench Molecular Dynamics" Simulation mit dem adsorbierten System durch.
- Analysieren Sie die Ergebnisse.

Beachten Sie allerdings, dass es keine Garantie gibt, dass es nicht noch tiefere Minima als die gefundenen gibt.