

Seminar Theoretische Modullierung und Simulation

Fragestunde

3 Juni 2016

Wiederholung Kraftfeldrechnungen

- ▶ benutze Programme
 - ▶ Gaussian
 - ▶ Materials Studio
- ▶ benutzte Kraftfelder
 - ▶ Dreiding
 - ▶ UFF (Universal Force Field)
- ▶ Möglichkeiten
 - ▶ Strukturoptimierung
 - ▶ Berechnung der Bindungslängen
 - ▶ Berechnung der Grundzustandsenergie

Die Kraftfeldmethode

- ▶ empirischer Ansatz zur Berechnung der Struktur und Energie molekularer Systeme
- ▶ klassische Betrachtung der Atome bzw. Atompaaire
 - ▶ Atome sind Massepunkte, die mit Federn verbunden sind
- ▶ verschiedene Kraftfelder unterscheiden sich im Wesentlichen durch die Referenzsysteme, durch die die Parameter des Kraftfeldes bestimmt werden

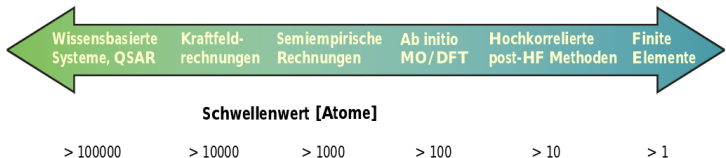
- ▶ jedes Kraftfeld ist nur so gut wie seine Parametrisierung
- ▶ klassische Methode, d. h. keine explizite Betrachtung von Elektronen

Berücksichtigte Energiebeiträge

$$E = E_{bind} + E_{wink} + E_{tors} + E_{nb} + E_{coul} + E_{opt}^1 \quad (1)$$

- ▶ E_{bind} = Bindungsdehnung und -stauchung
- ▶ E_{wink} = Bindungswinkeldeformation
- ▶ E_{tors} = Torsionswinkeländerung
- ▶ E_{nb} = nichtbindende Wechselwirkungen
- ▶ E_{coul} = elektrostatische Wechselwirkungen
- ▶ E_{opt} = spezifische Wechselwirkungen
(z. B. Wasserstoffbrückenbindungen)

Hierarchie von Methoden der theoretischen Chemie²



²online-media.uni-marburg.de/chemie/bioorganic/theorie/pdf/Teil1_Ab_initio.pdf

Maple

- ▶ hilfreiches Programm zum:
 - ▶ integrieren
 - ▶ differenzieren
 - ▶ plotten
- ▶ bekannte Befehle:
 - ▶ with(plots)
 - ▶ evalf()
 - ▶ restart
 - ▶ diff(Fkt., Variable)
 - ▶ solve(Fkt.=[], Variable)
 - ▶ fieldplot3d: z. B. fieldplot3d(Fkt.,x=-2..2,y=-2..2,z=-2..2)
 - ▶ smartplot3d(Fkt.)
 - ▶ extrema(Fkt., evt. Bedingung)

Gnu/Linux, der Freund aller Theoretiker

Befehl	Beschreibung
cd Bilder	in den Ordner Bilder gehen
cd .. / (cd ../..)	einen (bzw. zwei) Ordner zurück gehen
ls / ls -la	zeigt L. bzw. detaillierte L. von Dat. im akt. Ord. an
pwd	zeigt den aktuellen Ordner und Unterordner an
mkdir	neuen Ordner erschaffen
cp file1 Ordner1	file1 in Ordner kopieren
mv file1 file2	file1 in file2 umbenennen oder verschieben
rm file	file entfernen
rmdir Ordner	Ordner löschen
rm -r Bilder	den Ordner Bilder löschen
rm file	file löschen
(head file	zeigt die ersten Zeilen von file an)
(tail file	zeigt die letzten Zeilen von file an)
(vi file	öffnet file mit dem vi Editor)