



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 2, 25.04.2018

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im **Linux Pool, PC-Pool 8, O25/450**, am Donnerstag, dem 03.05.2018, und am Freitag, dem 04.05.2018, jeweils 12 bis 14 Uhr

Aufgabe 4: Linux

Wissenschaftliche Rechner benutzen heutzutage vorwiegend Linux als Betriebssystem. Außerdem basieren MAC-Rechner auf einem Unix-Betriebssystem. Daher sollen Sie einige grundlegende Befehle zum Arbeiten auf Linux- bzw. Unix-Rechnern kennenlernen im PC-Pool 8:

<https://www.uni-ulm.de/einrichtungen/kiz/service-katalog/desktop-computing/pc-pools/pc-pool-8/>

Nach der Übung sollten Sie beantworten können, was die folgenden Linux-Befehle bedeuten:

- mkdir Praktikum
- pwd
- mv test.txt test2.txt
- cp test.txt test2.txt
- Mit welchem Linux Befehl löscht man eine Datei?
- Mit welchem Linux-Befehl wechselt man in ein anderes Verzeichnis?

Von einem Windows-Rechner können Sie sich z.B. mit Hilfe des Programms Putty auf Linux-Rechnern einloggen. In der Übung in der nächsten Woche sollen Sie versuchen, zu dem Rechner login.rz.uni-ulm.de eine Verbindung von einem Windows-Rechner aus herzustellen.

Aufgabe 5: Lennard-Jones Potential

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

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

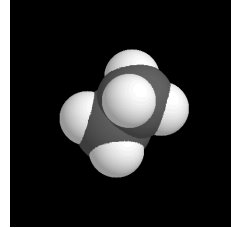
$$= 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right) \quad (2)$$

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

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?

