



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 2, 08.05.2019

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen am Donnerstag, dem 09.05.2018, und am Freitag, dem 10.05.2018.

Aufgabe 4: Lennard-Jones Potential

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

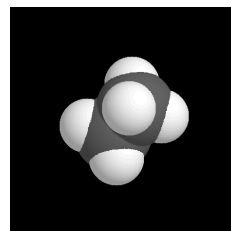
$$U_{L-J} = \left(\frac{C_{AB}^{12}}{R_{AB}^{12}} - \frac{C_{AB}^6}{R_{AB}^6} \right) \quad (1)$$

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

- 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: 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. Was besagt diese Gesamtenergie? Führen Sie die Rechnungen mit dem Programmpaket *GAUSSIAN* durch.



- 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?

