

Theoretische Modellierung und Simulation

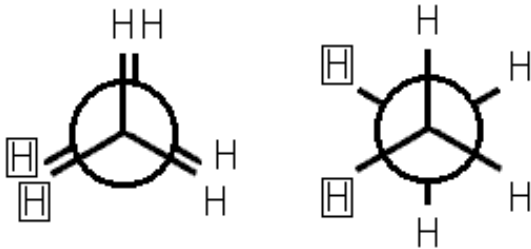
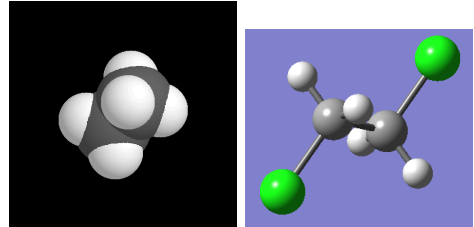
Übungsblatt Nr. 2, 06.05.2020

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

Die Aufgaben werden besprochen in der nächsten Woche auf der Moodle-Plattform

Aufgabe 4: Molekularmechanik

Berechnen Sie die Energie von Ethan (C_2H_6) und Chlor-substituiertem Ethan (CH_2Cl-CH_2Cl) als Funktion des Diederwinkels. Wie groß ist der Unterschied der Energie in der ekliptischen und der gestaffelten Konformation? Tragen Sie die Energie als Funktion des Diederwinkels auf.



Hinweis: Da wir die Gesamtenergie dieser Moleküle nicht im Chemie-Computer-Labor berechnen können, müssen wir unser eigenes Kraftfeld erzeugen. Wir nehmen dazu an, dass die Wechselwirkung durch die Coulombwechselwirkung

$$U_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_i Q_j}{R_{ij}}, \quad (1)$$

zwischen festen Partialladungen Q_i gegeben ist.

Ethan C_2H_6 : Die C-H Bindung ist sehr schwach polar, Kohlenstoff ist aber etwas elektronegativer als Kohlenstoff. Daher nehmen wir an, dass $Q_H = 0.05e^-$ und $Q_C = -0.15e^-$ sind, wobei e^- die elektronische Elementarladung ist. Weiterhin nehmen wir an, dass die C-C Bindung $1,5 \text{ \AA}$ und die C-H Bindungen $1,0 \text{ \AA}$ lang sind. Außerdem sollen die H-C-C Bindungswinkel, d.h. der Winkel zwischen der C-H und der C-C Bindung der Einfachheit halber 90° betragen.

Chlor-substituiertem Ethan CH_2Cl-CH_2 : Hier habe nun das Chlor die Partialladung $Q_{Cl} = -0.3e^-$ und Wasserstoff $Q_H = 0.05e^-$, so dass der Kohlenstoff aus Ladungserhaltungsgründen die Ladung $Q_C = 0.15e^-$ hat.

Beachten Sie weiterhin, dass sich die C-H, C-Cl und C-C Abstände und die H-H Abstände innerhalb einer Methylgruppe während der Torsionsdrehung nicht ändern, d.h. sie müssen zur Berechnung der Rotationsbarriere nicht berücksichtigt werden. Vergleichen Sie die Ergebnisse mit den Ergebnissen aus Abbildung 2.7 im Skript. Welche Schlussfolgerungen kann man daraus ziehen?