



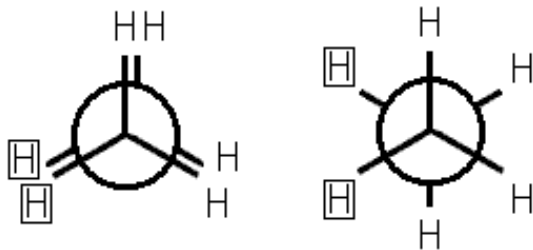
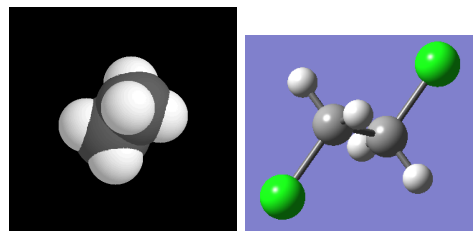
Theoretische Modellierung und Simulation Übungsblatt Nr. 3, 13.05.2020

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 5: Nochmals Ethan Molekularmechanik

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



Hinweis: Wir haben inzwischen ein Programm identifiziert, mit dem Sie auf Ihrem PC oder Laptop Kraftfeldrechnungen durchführen können, Avogadro, <https://avogadro.cc/> Auf der Moodle Plattform haben wir Ihnen ein Video bereitgestellt, in dem wir Ihnen die Installation und die Benutzung von Avogadro erklären. Außerdem ist gezeigt, wie die Energie von Ethan als Funktion des Diederwinkels berechnet werden kann.

Stellen Sie Ihre berechnete Ergebnisse zur Energie von Ethan und Chlor-substituiertem Ethan in einem geeigneten Diagramm dar und laden dies zusammen mit einem Avogadro-Bild von Chlor-substituiertem Ethan auf der Moodle Plattform hoch. Normalerweise war der Besuch des Seminars in Chemie-Computer-Labor Voraussetzung für die Teilnahme an der Klausur. Dieses Semester wird der Upload von geforderten Dokumenten Teil der Leistungskontrolle sein, die zur Teilnahme an der Klausur berechtigt!

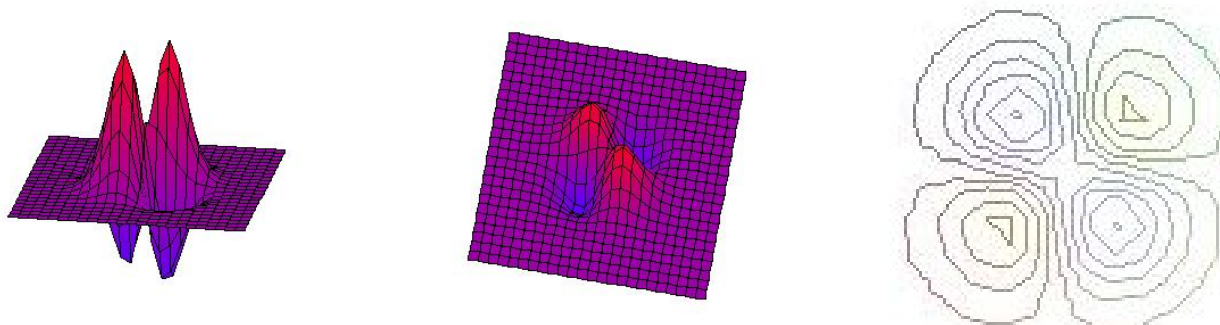
Bitte wenden!

Aufgabe 6: Potentialhyperfläche

Eine Potentialhyperfläche, die z.B. eine Austauschreaktion $AB + A \rightarrow A + BA$ beschreiben könnte, sei in beliebigen Energieeinheiten gegeben durch

$$V(x, y) = (0, 1 + x \cdot y) \cdot e^{-(x^2+y^2)} \quad (1)$$

Die Seiten-, Drauf und Höhenlinienansicht der Potentialhyperfläche sieht wie folgt aus:



a) Bestimmen Sie die Extrempunkte der Potentialhyperfläche (Minima, Maxima, Sattelpunkte)?

b) Wie hoch ist die Reaktionsbarriere, um von einem Minimum in das andere zu kommen?

Hinweis: Bei der analytischen Lösung können Sie ausnutzen, dass die Extrema bei Punkten (x, y) liegen, für die gilt: $x = y$ oder $x = -y$.

Laden Sie zusätzlich ein selbsterstelltes Bild der Potentialhyperfläche hoch, dass Sie zum Beispiel mit Hilfe der Webseite <http://www.arndt-bruenner.de/mathe/scripts/jsplotter3d.htm> erzeugt haben!