Übungen zur Vorlesung „Computational Chemistry“ SS25

Übungsblatt 6 Abgabe bis 02.06.2025 vor der Übung

Vorname, Name:

Matrikelnummer:

1. Skizzieren Sie den Verlauf der Energie (Summe aus kinetischer und potentieller Energie) mit der Zeit, wenn Sie

a) einen Produktionslauf im NVT-Ensemble bei Raumtemperatur durchführen

b) im NVE-Ensemble zunächst von 0K aufheizen, und dann weiter bei Raumtemperatur simulieren

(je 10 Punkte)

2. Verwenden Sie für diese Frage die Daten auf Seite 5 der 6. Vorlesung. Die Punkte M und L werden bei der Berechnung der van der Waals Energie nicht berücksichtigt.

a) Um welchen Faktor (ungefähr) steigt der Rechenaufwand für den Elektrostatikterm in typischen Kraftfeldern, wenn man das TIP5P Wassermodell anstelle von TIP3P verwendet? (10 Punkte)

b) Unterscheidet sich der Aufwand für den van der Waals-Term zwischen TIP3P und TIP4P? Bitte kurze Begründung angeben. (10 Punkte)

3. Warum muß man die Geschwindigkeit des Massenschwerpunktes in MD-Simulationen immer wieder zurücksetzen? (10 Punkte)

4. Führen Sie eine Monto Carlo Simulation an dem Molekül C7H16.pdb durch. Modifizieren Sie dazu Ihr Programm vom 4. Übungsblatt folgendermaßen:

Anzahl der Schritte: 10.000
Veränderen Sie die jeweiligen Koordinaten aller Atome zufällig, indem sie diese um Δ verändern (x_neu = x_alt ± Δ; ebenso für die y und z Koordinaten). Δ = 10 * rand()

Eine neue Konformation wird akzeptiert wenn ihre Energie niedriger ist als die der vorherigen Konformation, oder falls höher nach dem Boltzmann-Kriterum wie in c).

Zur Abschätzung der Entropie S werden die Anzahl Ω unterschiedlicher Cluster von Konformationen verwendet:

$$S = k_b \ln \Omega \quad \text{mit } k_b = 1.3806 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

Eine Konformation erzeugt einen neuen Cluster wenn deren RMSD um mehr als 0.20 Å von bestehenden Clustern abweicht.

$$RMSD = \sqrt{1/natoms \sum_{i}^{natoms} (x_i - x_{ref})^2 + (y_i - y_{ref})^2 + (z_i - z_{ref})^2}$$

Wieviele Cluster tauchen auf ?
Führen Sie das Programm dazu 10 mal aus.

Berechnen Sie die thermische Energie dieses Moleküls bei 298K. $E = \frac{f}{2} RT$
Anzahl der Freiheitsgrade f = (3 · Anzahl Atome) − 6
R = 8.314 J mol^{-1} K^{-1}
1 cal = 4.1868 J

Sind die Konformationen die gegen Ende der Simulation erhalten werden damit bei 298K spontan zugänglich?

(50 Punkte)