
MOLEKÜLE MODELLIEREN

GRUPPE 23

DAVID RAESE
01628909
REMON HOZEIN
01606055

Inhaltsverzeichnis

1	Abstract	2
2	Ethan	3
2.1	Aufgabenstellung	3
2.2	Diagramm der Rotationsbarrieren	3
2.3	Auswertung der erhaltenen Werte	4
2.4	Statistische Fehlerrechnung	5
2.5	Vergleich der Methoden	5
2.6	Schwingungsspektrum und Bestzungszahlen bestimmen	5
2.7	Berechnung der Geschwindigkeitskonstante der Rotation	5

1 Abstract

2 Ethan

2.1 Aufgabenstellung

1. Energie in Abhängigkeit des Diederwinkels zeichnen und die Anzahl der Min- bzw. Maxima bestimmen.
2. Auswertung der erhaltenen Werte.
3. Statistische Fehlerrechnung
4. Vergleich der Methoden
5. Schwingungsspektrum und Bestzungszahlen bestimmen.
6. Berechnung der Geschwindigkeitskonstante der Rotation

2.2 Diagramm der Rotationsbarrieren

Da die beiden Kohlenstoffatome nur über ein σ -Bindung miteinander verbunden sind, können sich beide Enden frei drehen. Dabei sind manche Winkel energetisch günstiger als Andere. Dies ist gut zu sehen, wenn Ethan in der Newman-Projektion dargestellt wird.

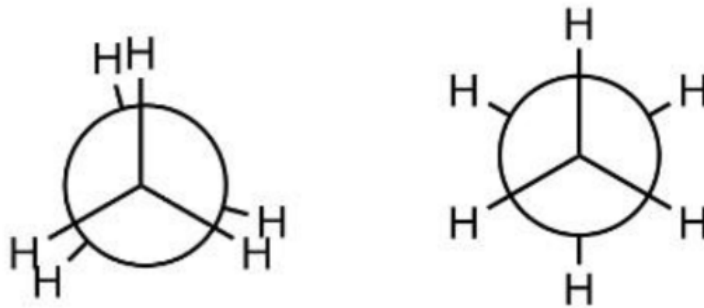


Abbildung 1: Newman Darstellung von Ethan

Wie man in Abbildung 1 erkennen kann gibt es zwei Extrema, links sind die H-Atome genau hintereinander angeordnet, es kommt somit zu einer größeren Abstoßung der negativ geladenen sp^3 -Orbitale. Diese Anordnung nennt sich auch "eclips". Bei der rechten Darstellung sind die Orbitale weiter voneinander entfernt, es können daher nicht zu einer so starken elektrostatischen Abstoßung kommen wie bei der Linken. Diese Anordnung nennt sich "staggered". Mit dem Programm HyperChem wurden in der Laboreinheit, die Energieunterschiede zwischen verschiedenen Diederwinkeln bestimmt. Dabei wurden von jedem Zweiterteam sechs semiempirische und zwei ab-initio Methoden verwendet (siehe Abbildung 2 und 3).

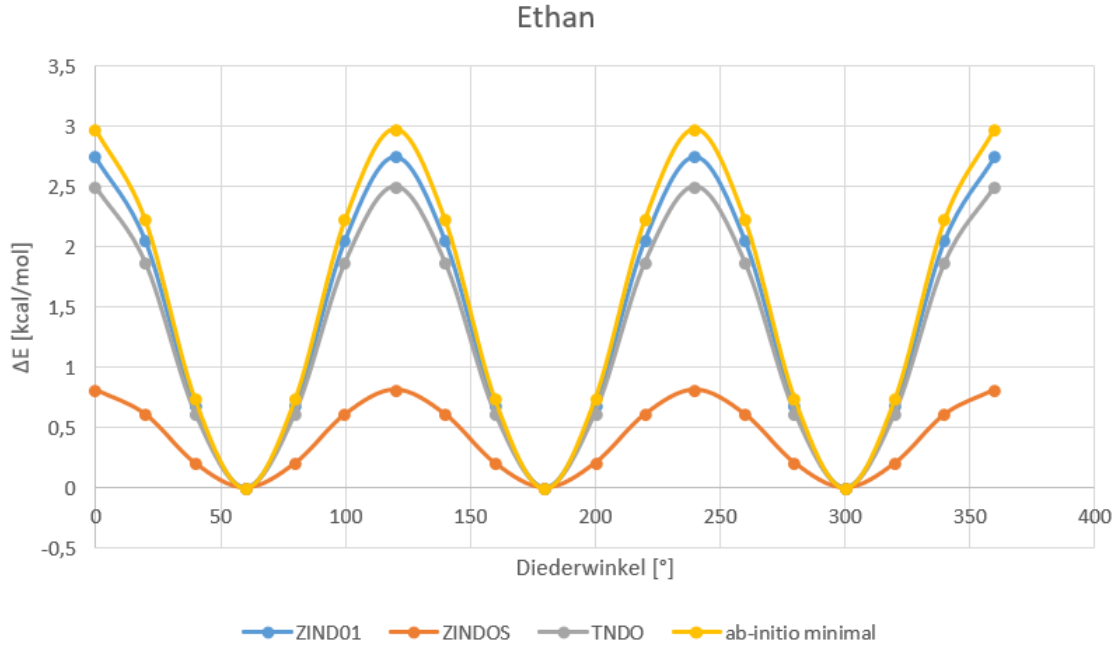


Abbildung 2: Graphische Darstellung der Energiedifferenz gegen den Diederwinkel

Um alle Graphen auf eine Achse zu skalieren, wurden von allen, mit HyperChem bestimmten Werte für die elektronische Anregung, die geringste elektronische Anregung subtrahiert. Desweiteren sieht man der Graph je vier Maxima und drei Minima bei einer Umdrehung von 360° hat. Wenn man bei der linken Anordnung aus Abbildung 1 bei 0° anfängt, dann sind die Maxima jeweils bei, 0°, 120°, 240° und wieder bei 360°. Die Minima befinden sich bei 60°, 180° und 300°.

Weiter ist noch zu sehen, dass alle Methoden verschiedene Ergebnisse liefern, das liegt an der Tatsache, dass jede Methode für eine bestimmte Aufgabe optimiert wurde und dann andere Parameter nicht berücksichtigt wurden.

2.3 Auswertung der erhaltenen Werte

Um den Energieunterschied zwischen der gestaffelten und der verdeckten Konformation zu bestimmen, müssen folgende Werte bekannt sein:

- Die maximale und minimale ZPE (Zero Point Energie).
- Die maximale und minimale Energie der elektronischen Anregung.

Mit diesen Werten kann über folgende Beziehung bestimmt werden:

$$\begin{aligned}\Delta \langle \tilde{e} \rangle (T) &= \Delta e^V(0) + \Delta e^{el}(0) \\ &= \Delta ZPE + \Delta e^{el}\end{aligned}$$

Damit gilt:

$$\Delta e_{mol} = \Delta ZPE + \Delta e^{el} \quad (1)$$

Tabelle 1: Berechnungen der Energien

Methode	e_{min}^{el} [kcal/mol]	ZPE_{min}	e_{max}^{el}	ZPE_{max}	Δe_{elec}	ΔZPE	Δe_{mol}
<i>ZINDO1</i>	-1821,79	65,93	-1819,04	65,25	2,75	-0,68	2,06
<i>ZINDOS</i>	-3491,39	64,06	-3490,57	62,86	0,82	-1,20	-0,38
<i>TNDO</i>	-1842,17	65,25	-1839,67	64,56	2,50	-0,69	1,81
<i>ab-initio minimal</i>	-49137,87	56,28	-49134,89	55,62	2,98	-0,66	2,33
							0,00
							0,00
							0,00
							0,00
<i>Mittelwert</i>					2,26	-0,81	0,73
<i>Stabw.</i>					0,98	0,26	1,13
<i>Präzision MW.</i>					0,40	0,11	0,46

2.4 Statistische Fehlerrechnung

Um den größtfehler von $\Delta e_{mol} = \Delta ZPE + \Delta e^{el}$ zu bestimmen, wird die Gauß'sche Fehlervorpflanzung benutzt.

$$f(x, y, \dots) = \left| \frac{\delta f}{\delta x} \right| \cdot \Delta x + \left| \frac{\delta f}{\delta y} \right| \cdot \Delta y + \dots \quad (2)$$

Um die Formel besser lesbar zu machen wird Δe_{mol} mit $f(x, y)$ ersetzt.

$$f(x, y) = \left| \frac{x+y}{\delta x} \right| \cdot \Delta x + \left| \frac{x+y}{\delta y} \right| \cdot \Delta y = \Delta x + \Delta y$$

2.5 Vergleich der Methoden

2.6 Schwingungsspektrum und Bestzungszahlen bestimmen

2.7 Berechnung der Geschwindigkeitskonstante der Rotation

Tabelle 2: Add caption

Method	e_{min}^{el} [kcal/mol]	ZPE_{min}	e_{max}^{el}	ZPE_{max}	Δe_{elec}	ΔZPE	Δe_{mol}
<i>MNDO</i>	-1821,792	25,780	-1819,042	25,710	2,749	-0,070	2,679
<i>AM1</i>	-3491,392	24,450	-3490,575	24,310	0,818	-0,140	0,678
<i>Mittelwert</i>					1,783	-0,105	1,678
<i>Stabw.</i>					1,366	0,049	1,415
<i>Präzision MW.</i>					0,558	0,020	0,578