

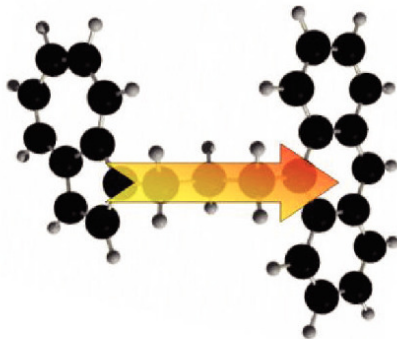


Christian Schröder (Autor)

Molekulardynamische Simulationen zum intra- und intermolekularen Schwingungsenergieübertrag von ausgewählten Molekülen

Christian Schröder

Molekulardynamische Simulationen zum intra- und intermolekularen Schwingungsenergieübertrag von ausgewählten Molekülen



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/3232>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentzsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen, Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	5
2.1	Intermolekularer Energietransfer	5
2.1.1	Stoßtheorien	6
2.1.2	“ <i>weak-coupling</i> ” - Theorien	8
2.1.3	Theorie der Instantanen Normalmoden	10
2.2	Intramolekularer Energietransfer	11
2.2.1	“ <i>Zeroth Order</i> “-Zustände	14
2.2.2	“ <i>Tier</i> “-Modell	16
2.2.3	Intramolekularer Energietransfer in isolierten Molekülen	18
2.2.4	Beschreibung des Kopplungsmusters durch den Quantenzahlenraum	19
2.2.5	Intramolekularer Energietransfer in kondensierter Phase	21
2.2.6	Klassische Wärmeleitung im Phononenbild	24
2.2.7	Wärmeleitung durch gekoppelte Oszillatoren	27
3	Grundlagen der molekulardynamischen Simulationen	33
3.1	Potentiale	34
3.1.1	Intermolekulare Potentiale	34
3.1.2	Intramolekulare Potentiale	35
3.1.3	“ <i>United Atom</i> ” - Modell	43
3.1.4	Parametrisierung des Kraftfeldes	46
3.1.5	Berechnung der Normalmoden	47
3.2	Simulationstechnik	50
3.2.1	Das Ensemble	50
3.2.2	Markov-Prozesse	52
3.2.3	Erzeugung von Startkonfigurationen	53
3.2.4	Integrationsverfahren	57
3.2.5	Periodische Randbedingungen	60
3.3	Trennung von Translation, Rotation und Schwingung	61
3.3.1	Beschreibung des Eckart-Koordinatensystems	61
3.3.2	Berechnung von Schwingungs- und Rotationsgeschwindigkeiten	62

4	Simulationen zum Methylendijodid	65
4.1	Parametrisierung des Kraftfeldes	65
4.1.1	Anpassung des Methylendijodids	65
4.1.2	Anpassung des Solvens Tetrachlorkohlenstoff	70
4.2	Isoliertes Methylendijodid	71
4.3	Methylendijodid in Tetrachlorkohlenstoff	79
4.3.1	Anregung der Kombinationsmode $\nu_1 + \nu_6$	79
4.3.2	Anregung der Fundamentalen ν_6	97
4.4	Zusammenfassung der Simulationsergebnisse am Methylendijodid	107
5	Simulationen zum intramolekularen Energiefluss in verbrückten Azulene-Anthrazen-Derivaten	109
5.1	Parametrisierung	110
5.1.1	Beschreibung des Azulenteils	111
5.1.2	Parametrisierung der Kette	116
5.1.3	Beschreibung des Anthrazens	118
5.2	Simulation der isolierten Derivate	122
5.2.1	Bedeutung kohärenter Beiträge für den intramolekularen Energiefluss durch die Kette	130
5.2.2	Diffusives Wärmeleitungsmodell	132
5.2.3	Transiente Temperaturprofile	133
5.2.4	Beschreibung des Energieflusses durch lokale Kettenmoden	135
5.2.5	Leistungsspektren an den Schnittstellen	143
5.2.6	Temperaturabhängigkeit des Energietransfers	144
5.3	Simulationen in Xenon	146
5.4	Der Schweratom - Effekt	148
5.4.1	Der Potentialeffekt	148
5.4.2	Der Masseneffekt	150
5.5	Zusammenfassung der Ergebnisse für die Azulene-Anthrazen-Derivate	156