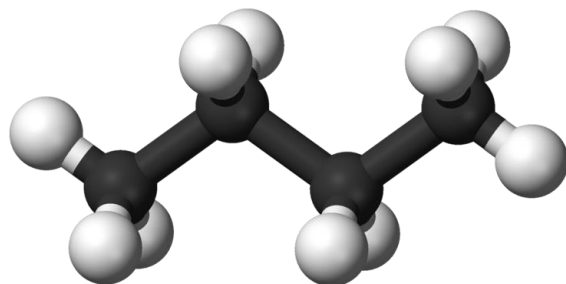


تمرین سری دوم درس دینامیک مولکولی: موعد تحویل سه شنبه ۱۴ اسفند

۱- یک مولکول بوتان را در نظر بگیرید.

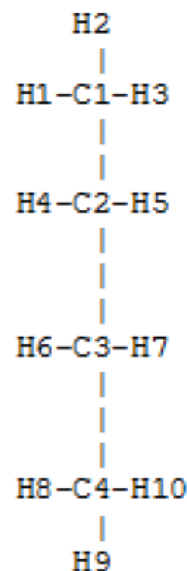


چیدمان اولیه اتم ها را به صورت زیر در نظر بگیرید. (فواصل بر حسب آنگستروم است).

ATOM	1	C	-0.602	0.486	0.000
ATOM	2	H	-0.744	0.874	1.010
ATOM	3	H	-0.411	1.317	-0.679
ATOM	4	C	0.605	-0.480	-0.015
ATOM	5	C	1.889	0.250	0.431
ATOM	6	H	1.763	0.631	1.445
ATOM	7	H	2.095	1.080	-0.245
ATOM	8	H	2.727	-0.447	0.411
ATOM	9	H	0.747	-0.867	-1.025
ATOM	10	H	0.413	-1.312	0.663
ATOM	11	H	-2.096	-1.071	0.235
ATOM	12	H	-1.759	-0.631	-1.457
ATOM	13	H	-2.724	0.454	-0.430
ATOM	14	C	-1.887	-0.245	-0.445

جرم اتمها و بار روی هر یک از آنها به صورت زیر است:

Atom Name	Atom Type	Atom Charge	Atom Mass
H1	HA	0.09	1.008
H2	HA	0.09	1.008
H3	HA	0.09	1.008
C1	CT3	-0.27	12.011
H4	HA	0.09	1.008
H5	HA	0.09	1.008
C2	CT2	-0.18	12.011
H6	HA	0.09	1.008
H7	HA	0.09	1.008
C3	CT2	-0.18	12.011
H8	HA	0.09	1.008
H9	HA	0.09	1.008
H10	HA	0.09	1.008
C4	CT3	-0.27	12.011



پارامترهای پتانسیل لnard-جونز عبارتند از: $V = \epsilon \left(\left(\frac{r_{eq}}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_{eq}}{r} \right)^6 \right)$

	$\epsilon \left(\frac{kcal}{mol} \right)$	$r_{eq} (\text{\AA})$
HA - HA	0.022	2.64

$CT2 - CT2$	0.055	4.35
$CT3 - CT3$	0.080	4.12

پارامترهای مربوط به کشش پیوندی در ادامه آمده است (توجه کنید ضریب یک دوم در انرژی وجود ندارد):

```
!V(bond) = Kb (b - b0)**2
!
!Kb: kcal/mole/A**2
!b0: A
!
!atom type Kb          b0
!
CT2  CT2  222.500  1.5300
CT3  CT2  222.500  1.5280
HA   CT2  309.000  1.1110
HA   CT3  322.000  1.1110
```

پارامترهای مربوط به خمش زاویه ای در ادامه آمده است:

```
ANGLES
!
!V(angle) = Ktheta (Theta - Theta0)**2
!
!V(Urey-Bradley) = Kub (S - S0)**2
!
!Ktheta: kcal/mole/rad**2
!Theta0: degrees
!Kub: kcal/mole/A**2 (Urey-Bradley)
!S0: A
!
!atom types      Ktheta  Theta0  Kub  S0
!
CT3  CT2  CT2  58.000  115.00  8.00  2.56100
HA   CT2  CT3  34.600  110.10  22.53  2.17900
HA   CT2  CT2  26.500  110.10  22.53  2.17900
HA   CT2  HA   35.500  109.00  5.40  1.80200
HA   CT3  HA   35.500  108.40  5.40  1.80200
HA   CT3  CT2  34.600  110.10  22.53  2.17900
```

پارامترهای مربوط به دایهدرال در ادامه آمده است:

```
DIHEDRALS
!
!V(dihedral) = Kchi (1 + cos(n(chi) - delta))
!
!Kchi: kcal/mole
!n: multiplicity
!delta: degrees
!
!atom types      Kchi  n  delta
X   CT2  CT2  X   0.1950  3  0.00
X   CT2  CT3  X   0.1600  3  0.00
CT3 CT2  CT2  CT3 0.1500  1  0.00
```

الف- برای مولکول بوتان Butane تعداد جملات کشش پیوندی، خمش زاویه ای، پیچش زاویه ای، و تعداد جملات غیر پیوندی وان در والسی و الکترو استاتیکی را بیابید.

ب- یک برنامه بنویسید و انرژی مولکول را بر اساس چیدمان اولیه اتم ها که در بخش الف انجام داده اید بیابید.