

PDF pokus

Kubečka Jakub

Harmonická vazba

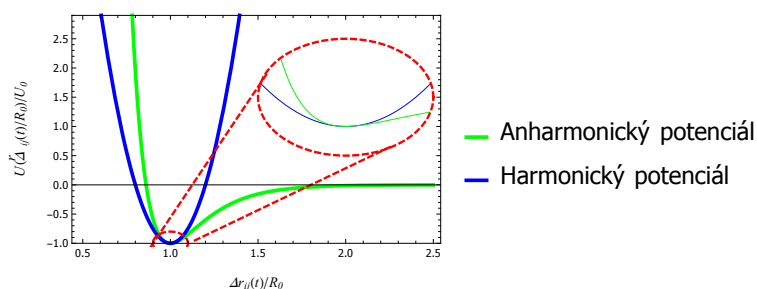
Vibrující oscilátory (pružinky) představují jednoduchý matematický model pohybu, který rozumně popisuje chování molekulové vazby v okolí svého minima, a proto bývá velmi často využíván v počítačové chemii. Oscilátorová rovnice vyjádřena jako vzdálenost mezi dvěma částicemi lze vyjádřit rovnicí

$$\Delta r_{ij}(t) = r_{\max} \cos(t \omega_0 + \phi_0),$$

kde r_{\max} představuje vzdálenost částic při maximálním natáčení, ω_0 úhlovou rychlost a ϕ_0 fázový posun. Do rovnic popisujících systém se zavádí pomocí interakčního potenciálu $U(\Delta r_{ij}(t))$ (viz Obrázek 1)

$$U(\Delta r_{ij}(t)) = 0.5 k \Delta r_{ij}^2(t),$$

kde pod konstantou uměrnosti k si lze představit pružnost vazby a U_0 hloubku potenciálové jámy pod 0. Interakční potenciál pak představuje energii samotné vazby.



Obrázek 3: Potenciál mezi dvěma částicemi spojenými harmonickou a anharmonickou vazbou.