

## Zusammenfassung

Am Beispiel des Modellsystems von Methan in Wasser werden ausgewählte thermodynamische und strukturelle Eigenschaften der hydrophoben Solvatation mit eigenen molekulardynamischen Simulationen berechnet und mit aus Simulationen und Experimenten in der Literatur bereits bekannten Daten verglichen.

Die mit den Simulationen aus Methan oder Wasser bestehenden Systeme erhaltenen Ergebnisse für die Temperatur- und Druckabhängigkeit von Dichte, mittlerer potenzieller Energie eines Moleküls und den radialen Verteilungsfunktionen werden mit publizierten Simulationen und experimentellen Daten verglichen.

Für die systematische Entwicklung der neuen Methan–Wasser Wechselwirkungspotenziale wird ein Simplex–Algorithmus eingesetzt. Die Zielfunktion des Simplex wird dabei so gewählt, dass die experimentelle Henry–Konstante bei 277 K möglichst genau reproduziert wird.

Mit dem neuen Methan–Wasser Wechselwirkungspotenzial werden die thermodynamischen und strukturellen Eigenschaften der hydrophoben Solvatation von Methan in Wasser untersucht. Für die Untersuchung der Thermodynamik werden das Exzess chemische Potenzial und die Henry Konstante ausgewählt. Die strukturellen Veränderungen werden an den radialen Verteilungsfunktion der Wassermoleküle und der Koordinationszahl der Wassermoleküle in der ersten Solvatationshülle untersucht.

Als Modell für das Wasser werden SPC, SPC/E, MSPC/E und TIP3P verwendet. Für das Methanmolekül wurden die Kraftfelder OPLS–UA oder TraPPE verwendet. Die nicht–gerichteten Lennard–Jones Wechselwirkungen zwischen dem Methan– und den Wassermolekülen werden entweder mit dem neu parametrisierten Wechselwirkungspotenzial ( $\sigma = 365$  pm ,  $\epsilon = 1,013$  kJ/mol) oder mit einer der vier beschriebenen Mischungsregeln berechnet.

Insgesamt ist die Übereinstimmung zwischen den eigenen und den Literatursimulationen gut. Die eigenen Simulationen zeigen, dass es möglich ist, thermodynamische und strukturelle Eigenschaften der reinen Phasen Wasser und Methan mit klassischen Kraftfeldern erfolgreich zu simulieren. Speziell SPC/E und OPLS–UA haben sich als sehr gut geeignet erwiesen.

Das in dieser Arbeit neu entwickelte Methan–Wasser Wechselwirkungspotenzial (P7) reproduziert bei den Simulationen mit SPC/E und OPLS–UA die experimentelle Henry–Konstante des Methans in Wasser wesentlich besser, als alle bisher in der Literatur beschriebenen Mischungsregeln.