

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Zustandsgleichungen für dipolare Fluide</b>	<b>5</b>
2.1	Konstruktionsprinzip der Zustandsgleichungen	7
2.2	Stockmayer-Fluid	9
2.2.1	Zustandsgleichung	10
2.2.2	Homogenes Zustandsgebiet	12
2.2.3	Flüssig-Dampf-Phasengleichgewichte	14
2.2.4	Binäre Mischungen aus Lennard-Jones- und Stockmayer-Molekülen	16
2.3	Dipolares Zwei-Zentren-Lennard-Jones Fluid	21
2.3.1	Zustandsgleichung	22
2.3.2	Homogenes Zustandsgebiet	23
2.3.3	Flüssig-Dampf-Phasengleichgewichte	25
2.3.4	Binäre Mischungen 2CLJ/2CLJD	26
2.4	Vorhersage thermodynamischer Eigenschaften realer Stoffe	33
<b>3</b>	<b>MD-Simulationen dipolarer polarisierbarer Fluide</b>	<b>40</b>
3.1	Modellierung elektrostatischer Wechselwirkungen	41
3.1.1	Reaktionsfeld	42
3.1.2	Ewaldsumme	45
3.1.3	Iterative Berechnung der effektiven Dipolmomente	46
3.2	Polarisierbares Stockmayer-Fluid	48
3.2.1	Test des MD-Programms	48
3.2.2	Vergleich der Ergebnisse von Ewald-Summe und Reaktionsfeld	50
3.3	Polarisierbares dipolares Zwei-Zentren Lennard-Jones Fluid	51
3.3.1	$\lambda$ -Kopplung für polarisierbare dipolare Fluide	52

3.3.2	Elongationsabhängigkeit des polarisierbaren Anteils zur freien Energie	53
<b>4</b>	<b>Zustandsgleichung für dipolare polarisierbare Fluide</b>	<b>57</b>
4.1	Störungstheorie	57
4.1.1	Konventionelle Störungstheorie (0-RPT)	58
4.1.2	Renormierte Störungstheorie (1-RPT)	60
4.1.3	Eigenschaften des Referenzsystems	63
4.1.4	Gegenüberstellung von Störungstheorie und Simulation	63
4.2	Konstruktion der renormierten Zustandsgleichung (1R-EOS)	67
4.3	Beurteilung der 1R-EOS	69
4.4	Prädiktive Anwendung der 1R-EOS auf reale Stoffe	75
4.5	Mischungen polarisierbarer dipolarer Fluide	80
4.5.1	Simulationen mit polarisierbaren Komponenten	80
4.5.2	Anwendung der 1R-EOS auf Mischungen	90
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>93</b>
<b>6</b>	<b>Anhang</b>	<b>97</b>
6.1	Parameter und Koeffizienten der Zustandsgleichungen	97
6.2	MD-Simulationsergebnisse zur Untersuchung der Elongationsabhängigkeit von $F_u$	100
6.3	Verschiedene MD-Simulationsergebnisse	104
	<b>Literatur</b>	<b>106</b>