



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 1, 28.04.2010

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Linux Chemie-Computer-Labor

Aufgabe 1: Elektrostatische Wechselwirkung

Berechnen Sie den Betrag der Kraft, die zwei Ladungen der Größe 1 C im Abstand von 1 m im freien Raum aufeinander ausüben. Wie groß müsste die Masse eines Teilchens sein, damit es im Gravitationsfeld der Erde die gleiche Kraft erfährt? Welche Schlussfolgerungen lassen sich dadurch für chemische Wechselwirkungen ziehen?

Aufgabe 2: Gradient

Benutzen Sie die Beziehung $\mathbf{F} = -\nabla U$, um das Vektorfeld \mathbf{F} (die Kraft) für folgende Skalarfelder U (Potentiale) zu finden:

a)

$$U = r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

b)

$$U = x^2 y^2 z^2$$

c)

$$U = \frac{1}{r}$$

Falls möglich, benutzen Sie eine Graphikprogramm, um die Skalarfelder und die resultierenden Vektorfelder darzustellen.