



## Theoretische Modellierung und Simulation

### Übungsblatt Nr. 11, 27.06.2012

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Linux Chemie-Computer-Labor, O26/198, am Freitag, den 06.07.2012

---

#### **Aufgabe 18:** Linux Chemie-Computer-Labor

In welchem Raum befindet sich das Linux Chemie-Computer-Labor?

#### **Aufgabe 19:**

Was bewirken die folgenden Linux-Befehle: a) mkdir Daten, b) pwd, c) mv Daten/ ../ ?

#### **Aufgabe 20:** Fundamentale Wechselwirkungen in der Chemie

Welche fundamentalen Wechselwirkungen gehen in den Hamiltonoperator ein, der relevant für die Beschreibung von Atomen und Molekülen ist?

#### **Aufgabe 21:** SCF-Schema

Warum ist eine iterative Vorgehensweise notwendig, um die Hartree-Fock- oder Kohn-Sham-Gleichungen zu lösen?

#### **Aufgabe 22:** Molekülschwingungen

Wie kann die Potentialkurve eines zweiatomigen Moleküls beschrieben bzw. angefitet werden? Schreiben Sie zwei explizite Ausdrücke als Funktion des Molekülabstandes hin.

#### **Aufgabe 23:** Molekulardynamik

Welche klassischen Bewegungsgleichungen gibt es und wie sehen sie aus? Benennen Sie Methoden zur Lösung der klassischen Bewegungsgleichungen.

#### **Aufgabe 24:** Elektronische Struktur

Berechnen Sie für Methan ( $\text{CH}_4$ ) die Gleichgewichtsstruktur sowohl mit Hartree-Fock und mit DFT. Bestimmen Sie das elektronische Spektrum, d.h. die Energien der elektronischen Ein-Teilchen-Zustände. Gibt es Entartungen? Was ist die Energiedifferenz zwischen dem höchsten besetzten Molekülorbital (engl. *Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO)) und dem niedrigsten unbesetzten Molekülorbital (engl. *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO))? Diese Zustände spielen eine besondere Rolle für die Reaktivität von Molekülen.

Stellen Sie das HOMO und das LUMO mit Hilfe der graphischen Benutzeroberfläche dar (z.B. mit GaussView). Plotten Sie außerdem die gesamten elektronische Ladungsdichte als Isooberfläche.

**Zusatzaufgabe:** Führen Sie die gleiche Schritte für Benzol ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ) durch.

#### **Aufgabe 25:** Letzte Aufgabe

Schauen Sie sich sämtliche bisherigen Übungsaufgaben (auch die dieses Übungszettels) und ihre Lösungswege sorgfältig an.