

Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 4, 20.05.2015

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

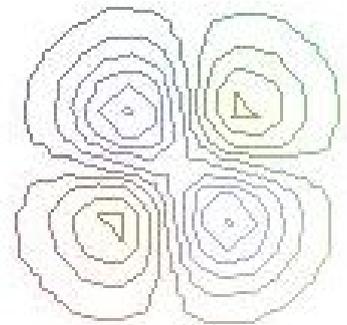
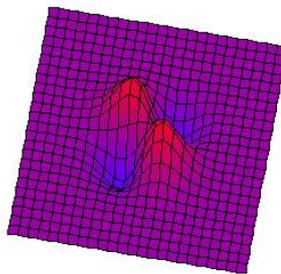
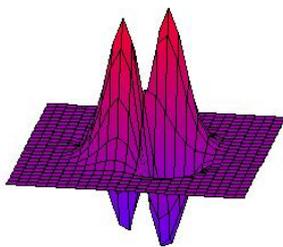
Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Chemie-Computer-Labor, O26/198, am Freitag, dem 22.05.2015, 8:30-10 Uhr, und am Mittwoch, dem 27.05.2015, 8:30-10 Uhr

Aufgabe 8: Potentialhyperfläche

Eine Potentialhyperfläche, die z.B. eine Austauschreaktion $AB + A \rightarrow A + BA$ beschreiben könnte, sei in beliebigen Energieeinheiten gegeben durch

$$V(x, y) = (0, 1 + x \cdot y) \cdot e^{-(x^2+y^2)} \quad (1)$$

Die Seiten-, Drauf und Höhenlinienansicht der Potentialhyperfläche sieht wie folgt aus:



- Bestimmen Sie die Extrempunkte der Potentialhyperfläche (Minima, Maxima, Sattelpunkte)?
- Wie hoch ist die Reaktionsbarriere, um von einem Minimum in das andere zu kommen?

Hinweis: Bei der analytischen Lösung können Sie ausnutzen, dass die Extrema bei Punkten (x, y) liegen, für die gilt: $x = y$ oder $x = -y$.