



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 1, 26.04.2017

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 28.04.2017

Vorbereitung Machen Sie Sich mit dem Chemie-Computer-Labor vertraut!

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, z.B. Maple, für das die Universität Ulm ein Campuslizenz besitzt und das in der Übung vorgestellt wird. Maple ist ein Computeralgebrasystem, d.h. die besondere Stärke des Programms liegt in symbolischen, mathematischen Berechnungen. Daneben kann man numerische Rechnungen durchführen, eigene Routinen programmieren, sowie 2D- und 3D- Grafiken und Animationen erzeugen.

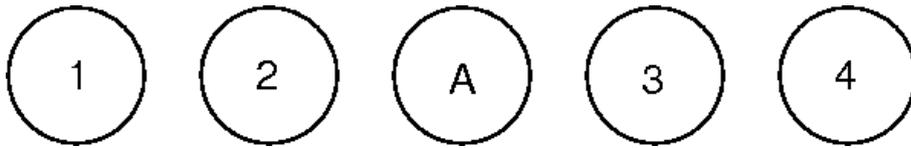
Hinweis: ∇ ist der Nabla-Operator, für den gilt:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right).$$

Bitte wenden!

Aufgabe 3: Bindungsenergie

Betrachten Sie die folgende lineare Anordnung von fünf Argon Atomen:



Die Gesamtenergie des Systems sei durch eine Summe von Paarwechselwirkungen gegeben, wobei die Potentialenergie der Atome i und j als U_{ij} geschrieben sei. Bestimmen Sie die Gesamtenergie des Systems, wenn das Atom A im Unendlichen ist, d.h. wenn die Wechselwirkung des Atoms A mit den anderen Atomen verschwindet.

Die Bindungsenergie ϵ_A eines Teilchens in einem System ist definiert als die Differenz der Energien für das Teilchen in seiner Bindungsposition und in unendlicher Entfernung. Zeigen Sie, dass die Bindungsenergie von A gegeben wird durch

$$\epsilon_A = U_{1A} + U_{2A} + U_{3A} + U_{4A} . \quad (1)$$