

## Theoretische Modellierung und Simulation

### Übungsblatt Nr. 4, 09.05.2018

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 Donnerstag, dem 17.05.2018, und am Freitag, dem 18.05.2018, jeweils 12 bis 14 Uhr

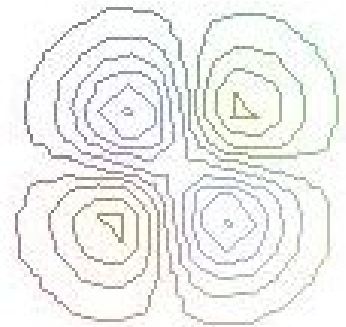
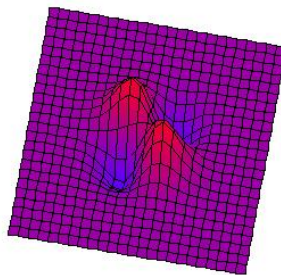
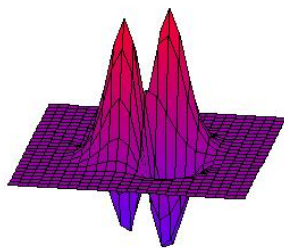
---

#### 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  $x = -y$ .