



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 12, 04.07.2018

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 12.07.2018, und am Freitag, dem 13.07.2018, jeweils 12 bis 14 Uhr

Aufgabe 22: Chemie-Computer-Labor

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

Aufgabe 23:

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

Aufgabe 24: Fundamentale Wechselwirkungen in der Chemie

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

Aufgabe 25: SCF-Schema

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

Aufgabe 26: Molekülschwingungen

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

Aufgabe 27: Molekulardynamik

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

Aufgabe 28: Letzte Aufgabe

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