

Treffpunkt AMMO

In der Chemie gibt es eine Fülle von teilweise heuristischen und qualitativen Regeln zur Beschreibung des chemischen Verhaltens von Atomen und Molekülen. Durch die mathematische Modellierung der Ladungsdichte von Molekülen können diese Regeln auf eine quantitative Grundlage gestellt werden.

Der Vortrag behandelt die topologische Analyse der Ladungsdichte und die sich hieraus ergebende mathematisch stringente Unterteilung eines Moleküls in Atome. Konzepte wie die chemische Bindung oder die kinetische Energie von Atomen in Molekülen werden hergeleitet. Ein Verfahren zur Berechnung von Eigenschaften von Atomen in Molekülen wird beschrieben.

Die theoretischen Konzepte werden mit Hilfe der Software AIM2000 illustriert.

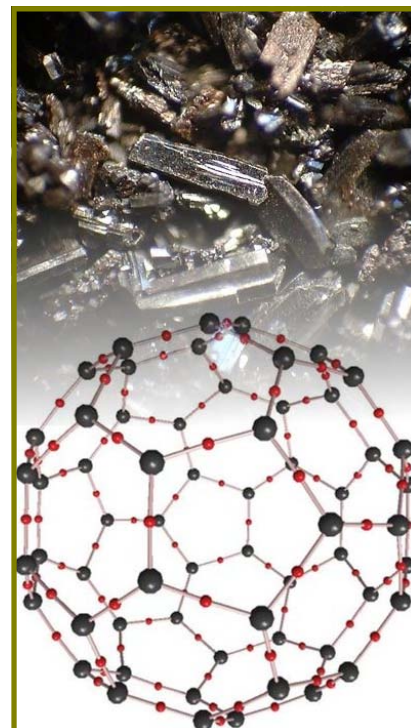


Foto: Gschnaller, Jochen

Mathematische Modellierung von Atomen in Molekülen

Donnerstag

26. Mai 2011

14:00 Uhr

Am Stadtholz 24

33609 Bielefeld

Raum A6

Referent: Prof. Dr. Friedrich Biegler-König (FSP AMMO, FH Bielefeld)

Moderator: Prof. Dr. Dr. Rainer Ueckerdt (FSP AMMO, FH Bielefeld)

Alle Interessierten sind herzlich eingeladen!

Veranstalter:

Fachhochschule Bielefeld – University of Applied Sciences

FB 3 – Lehrinheit Mathematik – FSP AMMO

<http://www.fh-bielefeld.de/ammo> – +49 521 106-7403 – ammo@fh-bielefeld.de