

Maxwell-Boltzmann-Verteilung

1. In der Datei `velocities.dat` finden Sie die eine Datenreihe experimentell bestimmter Geschwindigkeiten $v_i = |\vec{v}_i|$ eines Ensembles von $N = 1000$ Heliumatomen bei einer Temperatur $T = 300\text{K}$. Die Verteilung der Geschwindigkeiten entspricht idealerweise der Maxwell-Boltzmann Verteilung:

$$p(v) = 4\pi \sqrt{\frac{m}{2k_B T}} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right),$$

wobei $k_B \approx 1.38064\text{J/K}$ die Boltzmann-Konstante ist.

- Schreiben Sie ein Fortran-Programm, das diese Datenreihe aus der Datei in ein Array einliest.
- Berechnen Sie mit Hilfe Ihres Programms die mittlere Geschwindigkeit $\langle v \rangle$ (Mittelwert) der Heliumatome und die Standard-Abweichung σ_v .
- Berechnen Sie die mittlere kinetische Energie $\langle T \rangle = \frac{M\langle v^2 \rangle}{2}$ und die Temperatur des Ensembles $T = \frac{2\langle T \rangle}{3k_B}$, wobei die Masse für Helium $m_i = 4u$ und $M = Nm_i$ die Gesamtmasse ist.
- Für eine ideale Boltzmann-Verteilung gilt $\langle v \rangle = \int_0^\infty v \cdot p(v)dv = \sqrt{8k_B T/m\pi}$ und $\sqrt{\langle v^2 \rangle} = [\int_0^\infty v^2 \cdot p(v)dv]^{1/2} = \sqrt{3k_B T/m}$. Vergleichen Sie ihr Ergebnis für $\langle v \rangle$ und $\langle v^2 \rangle$ mit dem idealen Wert.
- Schreiben Sie alle Ergebnisse formatiert in eine Datei.

Anmerkung: Die erste Zahl in der Datei `velocities.dat` ist die Anzahl der Datenpunkte. (5 Punkte)

Hückel-Theorie

2. In der Vorlesung wurde das Programm zur Berechnung von Molekülorbitalen im Rahmen der Hückel-Theorie vorgestellt. Das Programm finden Sie auf der Website unter `hueckel.f90`. Es sollen nun die Spezialfälle für lineare bzw. cyclische Systeme betrachtet werden, woraus sich bestimmte Strukturen der Hückel-Matrix ergeben.
- Modifizieren Sie das Programm so, dass der Benutzer die Anzahl der Atome eingeben kann und auswählen kann, um welche Art (linear oder cyclisch) von Molekül es sich handelt.
 - Konstruieren Sie anhand dieser Eingaben die Hückel-Matrix.
 - Berechnen Sie die Molekülorbital-Energien für cyclische Systeme mit $n = 3$ bis $n = 6$ Kohlenstoffatomen, sowie für lineare Kohlenstoff-Ketten mit $n = 2$ bis $n = 20$ Atomen.
 - Berechnen Sie für den Fall der linearen Kohlenstoffketten die Energiedifferenz (Energiespalte) $\Delta E(n)$ zwischen höchsten besetzten (HOMO) und niedrigst unbesetzten (LUMO) Molekülorbital. Stellen Sie die Energiespalte als Funktion der Kettenlänge n graphisch dar und diskutieren Sie ihr Ergebnis.

(10 Punkte)