

BLATT 2

GRUNDLAGEN DER QUANTENCHEMIE UND DER KLASSISCHEN DYNAMIK

AUFGABE 1: Born-Oppenheimer Näherung

- (a) Was besagt die Born-Oppenheimer-Näherung (i) qualitativ und (ii) quantitativ?
- (b) Wie ist eine Born-Oppenheimer-Potentialfläche definiert?
- (c) Wieviel-dimensional sind die Born-Oppenheimer-Potentialflächen von (i) H₂, (ii) H₂O, (iii) Methan, (iv) Ethan, (v) Ethin? Wie viele Freiheitsgrade für Vibrationen existieren jeweils in diesen Molekülen?
- (d) Wie bestimmt man (Grundzustands-) Geometrien im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung bei (i) klassischer, (ii) quantenmechanischer Behandlung der Atomkerne?

AUFGABE 2: Van-der-Waals Wechselwirkungen

Die nichtbindende Van-der-Waals-Wechselwirkung (Dispersionswechselwirkung) zwischen zwei atomaren Fragmenten A und B im Abstand R wird häufig durch das sog. Lennard-Jones Potential genähert:

$$V_{\text{LJ}}(R) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right] \quad , \quad (1)$$

oder allgemeiner

$$V(R) = \frac{D}{R^{12}} - \frac{C_6}{R^6} \quad . \quad (2)$$

Für die Wechselwirkung von paarweise gleichen Edelgasatomen ($A = B$) erhält man die folgenden Parameter ϵ und σ :

	Ne	Ar	Kr	Xe
ϵ (eV)	0.0031	0.0104	0.0140	0.0200
σ (Å)	2.74	3.40	3.65	3.98

- (a) (i) Zeichnen Sie den qualitativen Verlauf des Potentials $V_{\text{LJ}}(R)$ und demonstrieren Sie die Bedeutung des Parameters σ .
 (ii) Bestimmen Sie den Gleichgewichtsabstand R_0 durch Berechnung des Potentialminimums. Welche Bedeutung hat ϵ ?
- (b) (i) Berechnen Sie die Konstanten C_6 und D in (2) durch Vergleich mit (1).
 (ii) Berechnen Sie C_6 und D für die Edelgase Ne, Ar, Kr, Xe mit Hilfe der Tabellenwerte.
 (iii) Begründen Sie mit Hilfe der London-Formel *qualitativ* den beobachteten Trend bzgl. der C_6 -Konstanten.
 (iv) Welche Abschätzung macht man üblicherweise für ϵ und σ , wenn die entsprechenden Werte für die homonuklearen Dimere bekannt sind? Berechnen Sie ϵ und σ für die Wechselwirkung von Ne mit Ar, Ne mit Kr, und Ne mit Xe.

AUFGABE 3: *Torsion im klassischen Kraftfeld*

- (a) Zeichnen Sie (qualitativ) den Verlauf der “Torsionskurve” $U_{TO}(\omega)$ für Butan, $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$, bei Drehung um den Diederwinkel ω um die zentrale C-C-Bindung.
- (b) Zeigen Sie, dass dieser Verlauf mit einer Funktion

$$U_{TO}(\omega) = \frac{1}{2} [V_1 [1 + \cos(\omega)] + V_3 [1 + \cos(3\omega)]]$$

beschrieben werden kann.