

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 2, Chemische Bindung (Modul A8)

Blatt 3

Aufgabe 6: *Dispersionswechselwirkungen.*

Die Dispersionswechselwirkung zwischen zwei Fragmenten A und B im Abstand R ist nach Lennard-Jones

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

oder allgemeiner:

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

Falls $A = B =$ Edelgasatom, so gilt für die Parameter ϵ und σ :

	Ne	Ar	Kr	Xe
ϵ / eV	0.0031	0.0104	0.0104	0.0200
$\sigma / \text{\AA}$	2.74	3.40	3.65	3.98

1. Zeigen Sie, (i) dass der nach (1) resultierende Gleichgewichtsabstand R_0 durch $R_0 = 2^{1/6}\sigma$ gegeben ist und (ii) dass ϵ als 'Topftiefe' aufzufassen ist. (iii) Welchen Wert ergibt $V_{LJ}(R)$ für $R = \sigma$?
2. (i) Berechnen Sie die Konstanten C_6 und D in (2) durch Vergleich mit (1) allgemein. (ii) Berechnen Sie C_6 für die Edelgase Ne, Ar, Kr, Xe mit Hilfe der Tabellenwerte. (iii) Begründen Sie qualitativ den beobachteten Trend bezüglich der C_6 -Konstanten.

Aufgabe 7: *Hamiltonoperator für Moleküle.*

1. Geben Sie den molekularen Hamiltonoperator für das H_2 -Molekül in SI- und in atomaren Einheiten an.

2. Geben Sie den molekularen Hamiltonoperator für H_2O in atomaren Einheiten an.
3. Geben Sie den elektronischen Hamiltonoperator für H_2O in atomaren Einheiten an.
4. Wie berechnet man eine Born-Oppenheimer-Potentialfläche für ein zweiatomiges Molekül?
5. Wie berechnet man den Gleichgewichtsabstand R_0 eines zweiatomigen Moleküls im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung (i) klassisch, (ii) quantenmechanisch für $T = 0 \text{ K}$, (iii) quantenmechanisch für $T > 0 \text{ K}$?