

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie für LA Chemie (Modul VM11)

Blatt 9

Aufgabe 24: *Potentialkurven zweiatomiger Spezies I.*

Chemisch gebundene zweiatomige Moleküle A-B werden häufig durch eine Morse-Potentialkurve

$$V_M(R) = D_e [1 - e^{-\beta(R-R_0)}]^2 \quad (1)$$

beschrieben, wobei R der Abstand zwischen den Atomen ist.

1. Zeichnen Sie die Potentialkurve $V_M(R)$ qualitativ.
2. Welche Bedeutung haben die Potentialparameter D_e und R_0 ? Deuten Sie diese in Ihrer Zeichnung an.
3. Welche Bedeutung hat der Parameter β ?

Aufgabe 25: *Potentialkurven zweiatomiger Spezies II.*

Van-der-Waals gebundene Dimere A-B werden häufig durch eine Lennard-Jones-Potentialkurve

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

beschrieben, wobei R der Abstand zwischen A und B ist. Das schreibt man auch gerne um zu

$$V_{LJ}(R) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right] \quad , \quad (3)$$

1. Zeichnen Sie die Potentialkurve $V_{LJ}(R)$ qualitativ.
2. Zeigen Sie, dass der nach (3) resultierende Gleichgewichtsabstand R_0 durch $R_0 = 2^{1/6}\sigma$ gegeben ist. (*Hinweis:* Bei R_0 liegt ein Minimum vor, also $dV_{LJ}/dR|_{R=R_0} = 0$.)
3. (i) Zeigen Sie, dass ϵ als "Topftiefe" aufzufassen ist. (ii) Welchen Wert ergibt $V_{LJ}(R)$ für $R = \sigma$?
4. Für Kr-Kr (Krypton-Dimer) ist $\epsilon = 0.02$ eV und $R_0 = 3.98$ Å, für He-He (Helium-Dimer) ist $\epsilon = 0.0031$ eV und $R_0 = 2.74$ Å. Berechnen Sie in beiden Fällen die zugehörigen C_6 -Parameter.

Aufgabe 26: *Hamiltonoperator für Moleküle.*

1. Geben Sie den molekularen Hamiltonoperator für das H_2^+ -Molekülion in SI- und in atomaren Einheiten an.
2. Geben Sie den molekularen Hamiltonoperator für H_2 in atomaren Einheiten an.
3. Was besagt die Born-Oppenheimer-Näherung?