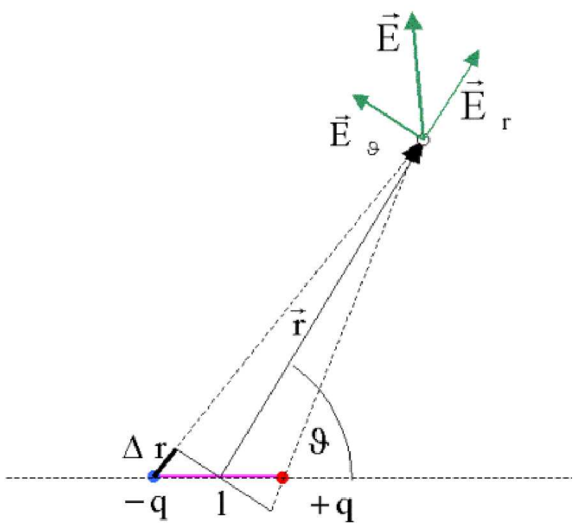
**Physik IV** SS 2007

**Blatt 1** Abgabe: Freitag 13.04.07, 12:00

## 1. Van der Waals Wechselwirkung *




Das elektrische Potential einer Ladung $q$ ist gegeben durch

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q}{r}. \tag{1}$$

(a) Berechne das Potential $\phi(r,\theta)$ eines Dipols $\vec{p} = q \cdot \vec{l}$ unter Verwendung der Näherung $l \ll r$, bwz. $\Delta r \ll r$.

(b) Berechne die Radialkomponente, die Azimutalkomponente und den Betrag des elektrischen Feldes $\vec{E}(r,\theta)$ eines Dipols mittels

$$\vec{E}(r,\theta) = -\vec{\nabla}\phi(r,\theta) = -\frac{\partial\phi}{\partial r}\vec{e}_r - \frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\vec{e}_\theta. \tag{2}$$

Ein Atom mit Dipol $\vec{p}_1$ kann in einem anderen Atom einen Dipol $\vec{p}_2 = \alpha E_1$ induzieren, wobei $\alpha$ die Polarisierbarheit des Atoms, und $r$ die Distanz zwischen beiden Atomen ist.

(c) Zeige unter Verwendung von $U = -\vec{p} \cdot \vec{E}$ wie die Wechselwirkungsenergie $U_{VdW}$ zwischen $\vec{p}_1$ und $\vec{p}_2$ von $r$ abhängt.

## 2. Lennard-Jones-Potential

Das Lennard-Jones-Potential beschreibt das Potential $U$ als Funktion des Abstandes $r$ zwischen 2 durch Van der Waals Wechselwirkung gebunden Atomen. Es ist gegeben durch:

$$U = 4U_0\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]. \tag{3}$$

Der Term mit $1/r^{12}$ ist eine phänomenologische Annäherung der abstossenden Kraft zwischen den Elektronenhüllen der Atomen.

(a) Diskutiere das Lennard-Jones-Potential anhand einer Skizze. Was sind die interessanten Fragestellungen?

(b) Bestimme das Minimum.

(c) Berechne die effektive Federkonstante für Schwingungen um das Minimum für $\sigma = 0.3$ nm und $U_0 = 1 \cdot 10^{-21}$ J (typische Werte für Edelgase).
*Hinweis:* Führe eine Taylorentwicklung des Potentials durch.

## 3. Normierung eines Molekülorbitals

Normiere für das Wasserstoffmolekülion ($H_2^+$-Ion) das Orbital:

$$\psi = N\{\phi_{1s}(\vec{r}_1) - \phi_{1s}(\vec{r}_2)\}, \tag{4}$$

wobei $\vec{r}_1 = \vec{r} - \vec{R}_1$ und $\vec{r}_2 = \vec{r} - \vec{R}_2$. Gebe den Wert für N an. Das benötigte Überlappungsintegral $S$ der Atomorbitale ergibt sich (abhängig vom Abstand der Atome $|\vec{R}_2 - \vec{R}_1|$) für $\mathrm{H}_2^+$ etwa zu 0.59.