



Übungsblatt 8 Abgabe bis 18.06.18 vor der Übung

Vorname, Name:

1. Kreuzen Sie an, für welche der folgenden Wechselwirkungen explizite Energieterme in quantenmechanischen (QM) Methoden bzw. in Molekülmechanischen Kraftfeldern (MM) vorhanden sind.

(15 Punkte)

MM QM

Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen den Atomzentren

Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen den Elektronen

Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen Atomzentren und Elektronen

Van der Waals Wechselwirkungen

Wasserstoffbrücken

2. Ein minimal basis set (Ja/Nein) (10 Punkte)

- a) ergibt immer die niedrigst mögliche Hartree-Fock-Energie
- b) enthält eine Basisfunktion für jedes Atomorbital
- d) enthält mehr als eine Basisfunktion für jedes Atomorbital
- e) enthält diffuse Funktionen

3. Man benutzt diffuse (+) Funktionen um (Ja/Nein) (10 Punkte)

- a) Rechenaufwand zu sparen
- b) Elektronendichte zu beschreiben die weit vom Atomkern entfernt ist
- c) Anionen besser zu beschreiben
- d) die inneren Schalen besser zu beschreiben
- e) freie Elektronenpaare besser zu beschreiben

4. Welche Aussagen trifft auf Gaussian-Type-Orbitale zu ? (Ja/Nein) (10 Punkte)

- a) Unterschätzen die Elektronendichte nah am Atomkern
- b) Beschreiben die Elektronendichte weit weg vom Kern schlechter als Slater-Type-Orbitale (STOs)
- c) Sind rechentechnisch schwieriger zu handhaben als STOs

6. Kreuzen Sie in den freien Feldern an, welches der jeweiligen semi-empirischen Verfahren am besten geeignet sind. (15 Punkte)

Eigenschaft	CNDO	INDO	MNDO	AM1	PM3
Geometrieoptimierung					
Bildungswärmen					
EPR-Spindichten					
Dipolmomente					
NO ₂ -Verbindungen					

7. Zeigen Sie, daß die normierte Linearkombination von ψ_{211} und ψ_{21-1} die Funktion für das 2p_x Orbital liefert. (40 Punkte)

$$\text{Ansatz: } \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{211} + \psi_{21-1}) = \psi_{2px} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} Z^{5/2} e^{-Zr/2} x$$

$$\text{Mit } \psi_{211} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} Z^{5/2} e^{-Zr/2} r \sin(\theta) e^{i\varphi} \text{ und } \psi_{21-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} Z^{5/2} e^{-Zr/2} r \sin(\theta) e^{-i\varphi}$$

$$\text{Hinweis: } e^{iz} = \cos z + i \sin z \text{ und } x = r \sin(\theta) \cdot \cos(\varphi)$$