



**Übungsblatt 8** Abgabe bis 24.06.2024 vor der Übung

**Vorname, Name:**

1. Welche der folgenden Aussagen über Elektronen trifft zu (Ja/Nein)? (12 Punkte)

- a) Besitzen als Fermionen einen halbzahligen Spin
- b) Besitzen als Bosonen einen ganzzahligen Spin
- c) Sind etwa 1800 mal schwerer als Protonen
- d) Besitzen Wellencharakteristik
- e) Besitzen Teilchencharakteristik
- f) Sind nicht unterscheidbar

2. Warum ist die Wellenfunktion für sich genommen keine physikalische Observable?  
(kurze Begründung) (10 Punkte)

3. Kreuzen Sie an, für welche der folgenden Wechselwirkungen entsprechende Energieterme in quantenmechanischen (QM) Methoden bzw. in Molekülmechanischen Kraftfeldern (MM) vorhanden sind. (10 Punkte)

	MM	QM
Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen den Atomzentren	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen den Elektronen	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen Atomzentren und Elektronen	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Van der Waals Wechselwirkungen	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Wasserstoffbrücken	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

4. Ein minimal basis set (Ja/Nein)

- a) ergibt immer die niedrigst mögliche Energie
  - b) wurde für kleine Moleküle optimiert
  - c) enthält eine Basisfunktion für jedes Atomorbital
- (6 Punkte)

5. Ein split-valence basis set (Ja/Nein)

- a) enthält mehr als eine Basisfunktion für jedes Orbital
  - b) verdoppelt die Rechenzeit
  - c) enthält mehr als eine Basisfunktion für jedes Orbital der Valenzschale
- (6 Punkte)

6. Die semiempirischen Verfahren MNDO, AM1 und PM3 (Ja/Nein)

- a) versuchen die Ergebnisse von *ab initio* Rechnungen zu reproduzieren
  - b) Sind an *ab initio* Rechnungen kalibriert
  - c) Sind an experimentellen Daten kalibriert
  - d) Verwenden Slater-Type-Orbitale
  - e) Verwenden Gaussian-Type-Orbitale
- (10 Punkte)

7. Zeigen Sie, daß die normierte Linearkombination von  $\psi_{211}$  und  $\psi_{21-1}$  die Funktion für das  $2p_x$  Orbital liefert. (46 Punkte)

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

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

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