

Aufgabe 7.1

a) Es handelt sich um *Van-der-Waals-Bindungen*.

b)

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (1)$$

$$\frac{dU}{dr}(r) = -24\epsilon \left[2 \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^7 \right] \stackrel{!}{=} 0, \quad r_0 = 2^{1/6}\sigma \approx 0.3817 \text{ nm} \quad (2)$$

Dies ist der Gleichgewichtsabstand, da es sich um ein lokales Minimum handelt, denn: $\frac{d^2U}{dr^2}(r_0) > 0$

c) $-U(r_0) = 4\epsilon \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{4} \right] = \epsilon = 1.613 \cdot 10^{-21} \text{ J}$. Dies ist geringer als $k_B \cdot 300 \text{ K} \approx 4.14 \cdot 10^{-21} \text{ J}$, entsprechend kann es keine Bindung geben.

d)

$$\frac{dF}{dr}(r) = 24\epsilon \left[26 \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{14} - 7 \left(\frac{\sigma}{r}\right)^8 \right] \stackrel{!}{=} 0, \quad r = \left(\frac{26}{7}\right)^{1/6} \sigma \approx 0.423 \text{ nm} > r_0 \quad (3)$$

Betrachtet man die zweite Ableitung so ist offensichtlich klar, dass es sich um ein Maximum handelt.

e) für kleine Abweichungen von r_0 gilt: $U(r) \approx U(r_0) + \frac{dU}{dr}(r_0)(r - r_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dr^2}(r_0)(r - r_0)^2$:

$$U(r') \approx -\epsilon + 0r' + 18 \cdot 2^{2/3} r'^2 \epsilon \quad (4)$$

$$\approx (-1 + 18 \cdot 2^{2/3} r'^2) \epsilon, \quad r' = r - r_0 \quad (5)$$