

# Physik von Makromolekülen und molekularen Systemen WS 2018/2019

Prof. J.P. Rabe und Prof. M. Ballauff

## Übungsblatt 1

### 1) van-der-Waals-Wechselwirkungspotential

Das Wechselwirkungspotential zwischen zwei Dipolen wird beschrieben durch

$$W = \frac{\mu_1 \mu_2}{4\pi \epsilon_0 r^3} f$$

mit  $f = 1 - 3 \cos^2 \theta$ , wobei  $\theta$  der Winkel zwischen den Dipolmomenten ist.

Zeigen Sie, dass für frei rotierende Moleküle das Potential im Mittel verschwindet:  $\langle W \rangle = 0$

Tatsächlich hängt aber das Potential von der gegenseitigen Orientierung ab, weshalb die Moleküle nicht vollkommen frei rotieren können. Berücksichtigt man diesen Umstand, so ist die mittlere potentielle Energie gegeben durch

$$\langle W \rangle = -\frac{C}{r^6}$$

mit

$$C = \frac{2 \mu_1^2 \mu_2^2}{3 (4\pi \epsilon_0)^2 kT}$$

Hinweis: Mitteln Sie die Orientierungen von  $f$ , indem Sie diese mit dem entsprechenden Boltzmannfaktor gewichten:

$$\langle W \rangle \propto \langle P f \rangle \quad \text{mit} \quad P = \exp(-W/kT) \quad \text{und} \quad W = \frac{\mu_1 \mu_2 f}{4\pi \epsilon_0 r^3} . \quad \text{Benutzen}$$

Sie die Annahme  $W/kT \ll 1$ .

### 2) Lennard-Jones Wechselwirkungspotential

Leiten Sie aus dem Lennard-Jones-Wechselwirkungspotential zweier neutraler Atome die Abhängigkeiten von  $R_0$  (Abstand für  $W_{\text{pot}}(R) = 0$ ), Bindungslänge  $R_e$  (Abstand für  $W_{\text{pot}}(R) = \text{Minimum}$ ) und der Bindungsenergie von den Lennard-Jones-Parametern  $a$  und  $b$  ab.