

## Quantenchemie (ThC1): Aufgabenblatt 1:

1. Mit einer DFT Methode können Sie für ein Molekül mit 20 Atomen eine MD Simulation mit 100 Zeitschritten am Tag berechnen. (a) Wieviele Zeitschritte kann man dann für ein Dimer dieses Moleküls berechnen? (b) Wieviele Zeitschritte erhalten Sie mit einer Semi-Empirischen Methode? (c) Mit DFT können Sie eine Energie für ein Molekül mit 100 Atomen am Tag berechnen. Für wieviele Atome kann dann eine Semi-empirische Methoden am Tag eine Energie berechnen? (d) Eine Energieberechnung für ein sehr grosses Molekül mit einer MM Methode dauert 2 Minuten. Wenn Sie die Molekülgrösse verdoppeln, wie lange dauert es dann? (e) Die MP2 Methode 'skaliert' mit  $N^5$ . Was bedeutet das?
2. Berechnen sie den Gradienten der Coulomb-Energie.
3. Zeigen Sie durch Einsetzen, dass die Überlagerung von  $\sin(kx-\omega t)$  und  $\cos(kx-\omega t)$  eine Lösung der Wellengleichung ist.
4. Zeigen Sie, dass  $y(x, t) = A \exp[i(kx - \omega t)]$  eine Lösung der Schrödingergleichung (ohne Potential  $V$ ) ist. Welche Bedingung erhalten Sie für  $c, \omega$  und  $k$ ? Was bedeutet dies? ('googeln' Sie nach 'Wellen' und 'Dispersion')
5. Schreiben Sie den Hamiltonoperator für Ethylen auf.