

Experimentalphysik IV (WS 2023/2024)

Übung 11

Tutorium: 2

Abgabe: 03.07.2024

Aufgabe 1: Van-der-Waals-Wechselwirkung

Die Anziehung zwischen zwei Molekülen werde durch die Van-der-Waals-Kräfte beschrieben. Untersuchen Sie die Abstandsabhängigkeit dieser Kräfte! Betrachten Sie ein Molekül mit einem Dipolmoment \vec{p} , das entlang der x -Achse ausgerichtet ist.

- (a) Wie hängt das von einem Dipol hervorgerufene elektrische Feld vom Abstand x entlang der Dipolachse ab, wenn x groß gegenüber dem Dipolabstand ist?
-

Die Bearbeitung der Aufgabe verwendet das CGS-Gauß-System.

$$\begin{aligned}\Delta\Phi(\vec{r}) &= -4\pi\rho(\vec{r}) \\ \Rightarrow \Phi(\vec{r}) &= \int dV' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \\ &\approx \int dV' \rho(\vec{r}') \left(\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \Big|_{\vec{r}'=0} + \vec{\nabla}_{\vec{r}'} \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \Big|_{\vec{r}'=0} \cdot \vec{r}' \right) \\ &= \int dV' \rho(\vec{r}') \left(\frac{1}{|\vec{r}|} + \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{|\vec{r}|^3} \right) \\ &= \underbrace{\frac{Q}{r}}_{\text{Monopol}} + \underbrace{\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{r^3}}_{\text{Dipol}}, \quad \text{mit } \begin{cases} Q = \int dV \rho(\vec{r}) \\ \vec{p} = \int dV \vec{r} \rho(\vec{r}) \end{cases}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}) &= -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r}) \\ &= Q \frac{\vec{r}}{r^3} + \frac{3(\vec{p} \cdot \vec{r})\vec{r}}{r^5} - \frac{\vec{p}}{r^3} \\ &= \frac{Q\vec{r}}{r^3} + \frac{3(\vec{p} \cdot \vec{r})\vec{r} - \vec{p}r^2}{r^5}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}Q = 0, \vec{p} = p\vec{e}_x : \vec{E}(\vec{r}) &= \frac{3p(\vec{e}_x \cdot \vec{r})\vec{r} - p\vec{e}_x r^2}{r^5} \\ &= p \frac{3x\vec{r} - \vec{e}_x r^2}{r^5}\end{aligned}$$

$$\text{falls } \vec{r} = x\vec{e}_x : = \frac{2p}{x^3}\vec{e}_x \quad \checkmark$$

- (b) Betrachten Sie jetzt zusätzlich ein zweites, unpolarisiertes Molekül im Abstand x , entlang der x -Achse. Berechnen Sie die proportionale Abhängigkeit der potenziellen Wechselwirkungsenergie der beiden Moleküle von ihrem Abstand x zueinander.
-

$$\begin{aligned}
\Delta\Phi(\vec{r}) &= -4\pi\rho(\vec{r}) \\
\rho(\vec{r}) &= -\frac{1}{4\pi}\Delta\Phi(\vec{r}) \\
&= -\frac{1}{4\pi}\Delta\left(\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{r^3}\right) \\
&= \frac{1}{4\pi}\Delta\left(\vec{p}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{1}{r}\right)\right) \\
&= \frac{1}{4\pi}\vec{p}\cdot\vec{\nabla}\Delta\left(\frac{1}{r}\right) \\
&= \frac{1}{4\pi}\vec{p}\cdot\vec{\nabla}(-4\pi\delta(\vec{r})) \\
&= -\vec{p}\cdot\vec{\nabla}\delta(\vec{r})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{F} &= \int dV \rho(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}) \\
&= -\vec{p}\cdot\int dV \vec{E}(\vec{r})\vec{\nabla}\delta(\vec{r}) \\
&= \vec{p}\cdot\int dV \delta(\vec{r})\vec{\nabla}\vec{E}(\vec{r}) \\
&= \vec{p}\cdot\vec{\nabla}\vec{E}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}U &= -\vec{F} \\
&= -\vec{p}\cdot\vec{\nabla}\vec{E} \\
\Rightarrow U &= -\vec{p}\cdot\vec{E}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_{\text{ges}} &= U_1 + U_2 \\
&= -\vec{p}\cdot\vec{E}_{\text{ind}} - \vec{p}_{\text{ind}}\cdot\vec{E} \\
&= -\vec{p}\cdot\left(-\frac{2p_{\text{ind}}}{x^3}\vec{e}_x\right) - \vec{p}_{\text{ind}}\cdot\vec{E} \\
&= \vec{p}\cdot\left(\frac{2\alpha E}{x^3}\vec{e}_x\right) - (\alpha\cdot\vec{E})\cdot\vec{E} \\
&= \vec{p}\cdot\left(\frac{2\alpha}{x^3}\frac{2p}{x^3}\vec{e}_x\right) - \alpha\frac{4p^2}{x^6} \\
&= \frac{4\alpha p^2}{x^6} - \frac{4\alpha p^2}{x^6} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Für mathematische Dipole (ohne räumliche Ausdehnung), eines mit intrinsischem und einem mit induziertem Dipolmoment, gibt es somit keine Wechselwirkung, wenn sie bereits die gleiche Ausrichtung haben, da sich beide Terme gegenseitig wegheben. Für ausgedehnte Dipole wie Molekülen ist dies nicht der Fall. Die Korrektur zu den beiden Termen, muss aber im Fernfeld nahtlos in den hier durchgerechneten Fall übergehen, weshalb man einen "educated guess" machen kann, dass für große x die Proportionalität $U_{\text{ges}} \propto \frac{\alpha p^2}{x^6}$ gilt. ✓

(c) Berechnen Sie mit $\vec{F} = -\vec{\nabla}V$, die Proportionalität der Kraft zwischen den Molekülen zum

Abstand x .

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}V \propto \vec{\nabla} \frac{\alpha p^2}{x^6} \propto \frac{\alpha p^2}{x^7} \quad \checkmark$$

30/30

Aufgabe 2:

Die Größenordnung der Rotationsenergien relativ zu den elektronischen Energien im eV Bereich lässt sich aus einer semiklassischen Betrachtung und der Unschärferelation abschätzen. Man betrachte ein starres, zweiatomiges Molekül. Der quantenmechanische Ausdruck für die Energieniveaus aufgrund der Rotation dieses Systems lautet

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2\theta} j(j+1)$$

wobei j die Rotationsquantenzahl bezeichnet.

- (a) Zeigen Sie, dass bei einer klassischen Betrachtung in der die Atome umeinander rotieren, das Trägheitsmoment $\theta = \mu R^2$ ist, wobei μ die reduzierte Masse und R den Atomabstand bezeichnet.

Nach dem Satz von Steiner setzt sich das Trägheitsmoment θ zusammen aus dem Trägheitsmoment im Schwerpunktsystem θ_S , der Gesamtmasse M und dem Massenschwerpunkt \vec{R} :

$$\theta = \theta_S + MR^2$$

Reduzierte Masse und Massenschwerpunkt sind jeweils gegeben durch

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$
$$\vec{R} = \mu \left(\frac{\vec{r}_1}{m_2} + \frac{\vec{r}_2}{m_1} \right)$$

Sei für die Berechnung von θ_S die Rotationsachse $\vec{\omega} = \omega \vec{e}_z$, und $\vec{r}_1, \vec{r}_2 \in \text{span}\{\vec{e}_x, \vec{e}_y\}$, d.h. es ist nur eine Hauptträgheitsachse von Interesse.

$$\begin{aligned} \theta_S &= m_1 \left(\vec{r}_1 - \vec{R} \right)^2 + m_2 \left(\vec{r}_2 - \vec{R} \right)^2 \\ &= m_1 \vec{r}_1^2 + m_2 \vec{r}_2^2 - 2(m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2) \vec{R} + (m_1 + m_2) \vec{R}^2 \\ &= m_1 \vec{r}_1^2 + m_2 \vec{r}_2^2 - 2\mu(m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2) \left(\frac{\vec{r}_1}{m_2} + \frac{\vec{r}_2}{m_1} \right) + (m_1 + m_2) \mu^2 \left(\frac{\vec{r}_1}{m_2} + \frac{\vec{r}_2}{m_1} \right)^2 \\ &= m_1 \vec{r}_1^2 + m_2 \vec{r}_2^2 - 2\mu \left(\frac{m_1}{m_2} \vec{r}_1^2 + 2\vec{r}_1 \vec{r}_2 + \frac{m_2}{m_1} \vec{r}_2^2 \right) + (m_1 + m_2) \mu^2 \left(\frac{\vec{r}_1^2}{m_2^2} + \frac{\vec{r}_2^2}{m_1^2} + 2 \frac{\vec{r}_1 \vec{r}_2}{m_1 m_2} \right) \\ &= m_1 \vec{r}_1^2 + m_2 \vec{r}_2^2 - 2\mu \left(\frac{m_1}{m_2} \vec{r}_1^2 + 2\vec{r}_1 \vec{r}_2 + \frac{m_2}{m_1} \vec{r}_2^2 \right) + \mu \left(\frac{m_1}{m_2} \vec{r}_1^2 + 2\vec{r}_1 \vec{r}_2 + \frac{m_2}{m_1} \vec{r}_2^2 \right) \\ &= m_1 \vec{r}_1^2 + m_2 \vec{r}_2^2 - \mu \left(\frac{m_1}{m_2} \vec{r}_1^2 + 2\vec{r}_1 \vec{r}_2 + \frac{m_2}{m_1} \vec{r}_2^2 \right) \\ &= m_1 \vec{r}_1^2 + m_2 \vec{r}_2^2 - \frac{m_1^2}{m_1 + m_2} \vec{r}_1^2 - 2\mu \vec{r}_1 \vec{r}_2 - \frac{m_2^2}{m_1 + m_2} \vec{r}_2^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(m_1 - \frac{m_1^2}{m_1 + m_2} \right) \vec{r}_1^2 - 2\mu \vec{r}_1 \vec{r}_2 + \left(m_2 - \frac{m_2^2}{m_1 + m_2} \right) \vec{r}_2^2 \\
&= \left(\frac{m_1(m_1 + m_2) - m_1^2}{m_1 + m_2} \right) \vec{r}_1^2 - 2\mu \vec{r}_1 \vec{r}_2 + \left(\frac{m_2(m_1 + m_2) - m_2^2}{m_1 + m_2} \right) \vec{r}_2^2 \\
&= \mu (\vec{r}_1^2 - 2\vec{r}_1 \vec{r}_2 + \vec{r}_2^2) \\
&= \mu (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)^2 \quad \checkmark
\end{aligned}$$

(b) Zeichnen Sie das Niveauschema des starren Rotators für den Fall des CO-Moleküls ($R = 1.13 \text{ \AA}$) und bestimmen Sie die Energie des ersten angeregten Zustandes. (Nehmen Sie ein Periodensystem der Elemente zur Hilfe, um die Massen der Atome C und O herauszufinden.)

Die Massen sind

$$\begin{aligned}
m(\text{C}) &= \frac{12.011 \cdot 10^{-3}}{N_A} \text{ kg} = 2.00 \times 10^{-26} \text{ kg} \\
m(\text{O}) &= \frac{15.999 \cdot 10^{-3}}{N_A} \text{ kg} = 2.66 \times 10^{-26} \text{ kg}
\end{aligned}$$

Damit sind die Energieniveaus allgemein

$$\begin{aligned}
E_{\text{rot}} &= \frac{\vec{J}^2}{2\theta} = \frac{j(j+1)\hbar^2}{2\mu R^2} \\
&\approx j(j+1) \cdot 239 \mu\text{eV}
\end{aligned}$$

und die Werte der untersten Niveaus sind:

j :	0	1	2	3	4	5
$E_{\text{rot}}(j)$ in meV:	0.0	0.477	1.43	2.86	4.77	7.16

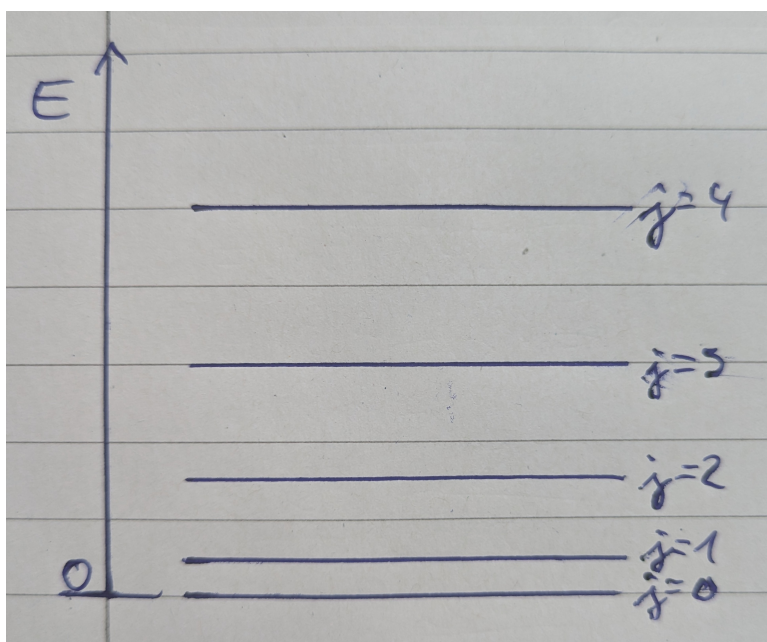


Abbildung 1: Skizze der Energieniveaus

- (c) *Rotationsbewegung eines H_2 -Moleküls: Wie groß muss die Temperatur T mindestens sein, damit die mittlere thermische Energie ausreicht, um den Zustand mit $J = 1$ anzuregen? (Abstand der H-Atome im H_2 -Molekül: 0.75 \AA .) Hinweis: Überlegen Sie sich die möglichen Freiheitsgrade für Bewegungen des Moleküls, die sich aus Translationen und möglichen Rotationen zusammensetzen.*

.....

Es gibt in der Summe 5 Freiheitsgrade, drei für Translationen, einen für Schwingungen wie in (a) und einen weiteren für radiale Schwingungen um die Gleichgewichtslage. Die mindest Temperatur ist daher

$$\langle E_{\text{th}} \rangle \geq E_{\text{rot}}(j = 1)$$

$$\frac{5}{2} k_B T \geq \frac{j(j+1) \hbar^2}{2 \mu R^2}$$

$$T \geq \frac{2 \hbar^2}{5 k_B \mu R^2}$$

$$= \frac{4 \hbar^2}{5 k_B m_H R^2}$$

$$\approx 7.54 \text{ K}$$

$$\mu = \frac{1}{2} m_H$$

- 2

18/20

Aufgabe 3: Schwingungsspektrum von Li_2

Das Schwingungsspektrum von Li_2 besteht aus Linien im Mikrowellenbereich, wobei der Abstand zweier benachbarter Linien jeweils $1.05 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$ beträgt. Berechnen Sie den Gleichgewichtsabstand der Bindungspartner in Li_2 .

- (a) *Nähern Sie zunächst das Molekülpotential im Minimum durch eine Parabel. Das Minimum des Potentials liegt beim Gleichgewichtsabstand R_0 und die Tiefe der Potentialmulde beträgt E_D . E_D bezeichnet hierbei die Dissoziationsenergie und beträgt für Li_2 1.10 eV . Geben Sie das Potential an und diskutieren Sie die Form! Durch welche experimentelle Beobachtung kann die gefundene Form des Potentials bestätigt und damit die Näherung gerechtfertigt werden?*

$$V(x) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x - R_0)^2 - E_D$$

Mit dem Parabelförmigen Potenzial hat man ein wohldefiniertes Minimum, jedoch sind die Grenzwerte für $x \rightarrow \pm \infty$ inkorrekt, da diese gleich null sein müssten. Für kleine Auslenkungen aus der Gleichgewichtslage, sollte dies aber, nach dem Prinzip der Taylorentwicklung, eine gute Näherung sein. Experimentell kann die Form des Potenzials bestätigen, bzw. die Parameter bestimmen, indem man die Frequenzen der Übergänge beobachtet. Für einen harmonischen Oszillator erwartete man einen konstanten Abstand Δf zwischen den emittierten Frequenzen.

- (b) *Schätzen Sie die Größenordnung des Gleichgewichtsabstandes R_0 ab. Dieser entspricht der*

Amplitude A eines harmonischen Oszillators bei dem die Vibrationsenergie $E_{\text{vib}} \approx E_D$, also in etwa der Dissoziationsenergie entspricht.

Bestimmen Sie damit einen Ausdruck für die "Federkonstante" des genäherten Potentials und bringen Sie diese in Relation mit der Schwingungsfrequenz, um auf R_0 zu schließen.

Hinweis: Um die Größenordnung des Gleichgewichtsabstandes R_0 abzuschätzen, nehmen Sie an, dass das Potential im Abstand von $\pm r_0/2$ vom Minimum auf die Hälfte seiner Tiefe (also auf den Wert $-E_D/2$) abgefallen ist. Alternativ können Sie sich überlegen, bei welchem Abstand das Molekül dissoziiert, also $V > 0$ gilt.

$$\Delta f = \frac{\Delta E}{h} = \frac{\hbar \omega}{h} = \frac{\omega}{2\pi}$$

$$\omega = 2\pi \Delta f \approx 6.60 \times 10^{13} \text{ Hz}$$

$$k = \mu \omega^2 = \frac{1}{2} m_{\text{Li}} \omega^2 \approx 25.0 \text{ kg/s}^2$$

$$E_D \approx \frac{1}{2} k A^2 = \frac{1}{2} \mu \omega^2 A^2$$

$$R_0 = A = \sqrt{\frac{2E_D}{\mu \omega^2}} \approx 1.19 \text{ \AA} \quad \checkmark$$

30/30

Der Literaturwert für R_0 ist 2.67 \AA , somit stimmt die Größenordnung.

Aufgabe 4: Streuung von Deuteronen an Tritium

In einem Neutronengenerator werden Deuteronen (${}^2_1\text{H}$) mit der Energie von $E = 0.1 \text{ MeV}$ auf ein senkrecht zum Strahl stehendes Tritiumtarget (${}^3_1\text{H}$) geschossen. In der Kernreaktion eines Deuteron mit einem Tritium wird jeweils ein freies Neutron erzeugt, das isotrop emittiert wird. Bei dieser Energie beträgt der Wirkungsquerschnitt für die Reaktion 8 b. Das Tritiumtarget besitzt eine Flächenbelegungsdichte von $\rho_F = \rho \cdot d = 0.2 \text{ mg/cm}^2$. Hierbei ist ρ die Dichte des Materials und d die Dicke des Targets.

- (a) Welcher Bruchteil der Neutronen erreicht einen $10 \times 10 \text{ cm}^2$ großen Detektor, der sich im Abstand von 5 m hinter dem Produktionstarget befindet?

$$\alpha \approx \frac{A_D}{4\pi r^2} \approx 0.0318\% \quad \checkmark$$

- (b) Welchen Flussrate muss der Deuteronstrahl haben, damit auf dem Detektor eine Rate von 100 Neutronen pro Sekunde eintrifft?

Hinweis: Nehmen Sie hierbei an, dass alle Neutronen ungestört und ohne weitere Wechselwirkung das Target verlassen und vernachlässigen Sie die Lebensdauer der Neutronen.

$$\sigma = \frac{1}{d \cdot \rho_T} \ln \left(\frac{N_0}{N_0 - N_{\text{Reaktion}}} \right)$$

$$= \frac{M}{d N_A \rho} \ln \left(\frac{N_0}{N_0 - N_{\text{Reaktion}}} \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{M}{N_A \rho_F} \ln \left(\frac{N_0}{N_0 - N_{\text{Reaktion}}} \right) \\
N_0 &= \exp \left(\frac{\sigma N_A \rho_F}{M} \right) (N_0 - N_{\text{Reaktion}}) \\
&= - \frac{\exp \left(\frac{\sigma N_A \rho_F}{M} \right)}{1 - \exp \left(\frac{\sigma N_A \rho_F}{M} \right)} N_{\text{Reaktion}} \\
&= \frac{N_{\text{Reaktion}}}{1 - \exp \left(- \frac{\sigma N_A \rho_F}{M} \right)} \\
R_0 &= \frac{R_{\text{Reaktion}}}{1 - \exp \left(- \frac{\sigma N_A \rho_F}{M} \right)} \\
&= \frac{R_D / \alpha}{1 - \exp \left(- \frac{\sigma N_A \rho_F}{M} \right)} \\
&\approx 1.96 \times 10^{10}
\end{aligned}$$

£

-8

17120

50/100