

III. Physikalisches Institut B, RWTH Aachen Prof. Dr. Christopher Wiebusch, Dr. Philipp Soldin

Übungen zur Physik IV - SS 2024 Atome Moleküle Kerne

Übung 11

Ausgabedatum: 26.06.24 Abgabedatum: 03.07.24 Tag der Besprechung: 08.07.24

Verständnisfragen

Kapitel 9.2

- 1. Wie unterscheiden sich die kovalente und ionische Bindung?
- 2. Was ist eine metallische Bindung?
- 3. Was ist eine Wasserstoffbrücken Bindung?
- 4. Wie entstehen Van-der-Waals Kräfte und was ist die van der Waals Bindung?
- 5. Wie sind Elektronenaffinität und Ionisationsenergie und Molekülbildungsenergie definiert und wie hängen sie zusammen?
- 6. Was beschreibt Elektronegativität und wie ist sie definiert?
- 7. Wie unterscheiden sich chemische Bindungen in ihrer typischen Stärke und Abstand der Atome?

Kapitel 9.3

- 8. Was beschreiben das Lennard-Jones und das Morse Potential?
- 9. Zu welchen Effekten kommt es bei der Bewegung der Atomrümpfe im Molekül?
- 10. Wie wird die Schrödingergleichung für die Kernbewegung gelöst?
- 11. Welche Energieniveaus ergeben sich für Vibrationen und Rotationen aus der Schrödinger Gleichung?
- 12. Skizzieren sie das Termschema für Moleküle!
- 13. Was sind Molekülbanden? Welche Molekülübergänge ergeben sich?
- 14. Wie funktioniert ein Mikrowellenspektrometer?
- 15. Wie funktioniert ein Infrarot Fourier-Spektrometer?
- 16. Was ist der Raman Effekt?
- 17. Wie funktioniert ein Raman-Spektrometer?
- 18. Welche Anwendungen gibt es für den Raman Effekt?
- 19. Erkären Sie Fluoreszenz und Phosphoreszenz!

Kapitel 10.1

- 20. Beschreiben Sie das Grundprinzip eines Streuexperimentes!
- 21. Was ist der Impulsübertrag und wie hängt er mit dem Streuwinkel zusammen?
- 22. Was ist Thomson Streuung?
- 23. Beschreiben Sie den Aufbau des Rutherfordschen Streuexperiments!
- 24. Was ist das überraschende Ergebnis des Rutherfordschen Streuexperiments? Warum kann das Ergebnis nicht mit Elektronen oder Thomson Streuung erklärt werden?

Übungsaufgaben

Aufgabe 1 ★★★☆☆ VAN-DER-WAALS-WECHSELWIRKUNG

 $(3 \times 10 = 30 \text{ Punkte})$

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?
- 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.

Hinweis: Die potenzielle Energie eines elektrischen Dipols \vec{p} in einem äußeren elektrischen Feld \vec{E} ist $E_{\rm pot} = -\vec{p} \cdot \vec{E}$, und der Betrag des im unpolaren Molekül induzierten Dipolmomentes ist proportional zum Betrag von \vec{E} .

c) Berechnen Sie mit $F_x = -\frac{\mathrm{d}E_{\mathrm{pot}}}{\mathrm{dx}}$, die Proportionalität der Kraft zwischen den Molekülen zum Abstand x.

Aufgabe 2 $\star \star \Leftrightarrow \Leftrightarrow \Leftrightarrow$ ROTATIONSSPEKTRUM

(5 + 5 + 10 = 20 Punkte)

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

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

wobei j die Rotationsquantenzahl bezeichnet.

- 1. 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.
- 2. Zeichnen Sie das Niveauschema des starren Rotators für den Fall des CO-Moleküls $(R = 1.13 \,\text{Å})$ 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.)
- 3. 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: $0.75\,\text{Å}$.)

Hinweis: Überlegen Sie sich die möglichen Freiheitsgrade für Bewegungen des Moleküls, die sich aus Translationen und möglichen Rotationen zusammensetzen.

Aufgabe 3 ★★★☆☆ SCHWINGUNGSSPEKTRUM VON LI₂

 $(10+20=30 \mathrm{\ Punkte})$

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 Li₂ 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?
- 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 Dissozationsenergie 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.

Aufgabe 4 ★ ★ ☆ ☆ ☆ STREUUNG VON DEUTERONEN AN TRITIUM

(10 + 10 = 20 Punkte)

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

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