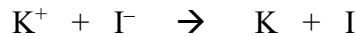


"Molekulare Kinetik"

SS 2023

11. Übungsblatt (zur Vorlesung 11: 30.06.2023)

1. Bei der Stoßneutralisation



wird nominell die Energie $\Delta E_0 = 1.28 \text{ eV}$ freigesetzt. Der Kreuzungspunkt der Potentialkurven für die Annäherung von K^+ an I^- bzw. K an I liegt bei R_x . Es ist $\Delta E(R_x) = 2.5 \text{ meV}$.

a) Berechnen Sie für gasförmiges K^+ und I^- bei $T = -200^\circ \text{ C}$, 300° C und 3000° C den Adiabatie-Parameter ξ für $R = R_x$.

Hinweis: Der Bereich, in dem der Abstand der beiden Potentialkurven $\approx \Delta E(R_x)$ ist, beträgt $a = 2.2 \text{ pm}$.

b) Berechnen Sie die Gesamtwahrscheinlichkeit P_{ges} für Stoßneutralisation nach Landau-Zener für $R = R_x$ bei den drei verschiedenen Temperaturen aus a).

c) Nehmen Sie nun an, die Wechselwirkung zwischen K und I bzw. K^+ und I^- werde durch folgende Potentiale beschrieben:

$$V_{KI}(R) = 0 \quad \text{für } R > R_r$$

$$V_{K^+I^-}(R) = \Delta E_0 - \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \frac{e^2}{R} \quad \text{für } R > R_r$$

mit $R_r < R_x$. Berechnen Sie R_x .

d) Zeigen Sie nun (Potentiale, $\Delta E(R_x)$ und R_x sind bekannt), dass, wie oben bereits angegeben, $a = 2.2 \text{ pm}$.

(8 Pkte.)

2. Die Stoßtheorie liefert für die Geschwindigkeitskonstante einer bimolekularen Reaktion den

Ausdruck $k(T) = P \sigma N_A \sqrt{\frac{8kT}{\pi\mu}} e^{-\frac{E_0}{RT}}$.

Wie müssen in der Arrhenius-Formel $k(T) = A e^{-\frac{E_A}{RT}}$ präexponentieller Faktor A und Aktivierungsenergie E_A gewählt werden, damit die beiden Ausdrücke übereinstimmen?

(4 Pkte.)