

"Molekulare Kinetik"

SS 2023

7. Übungsblatt (zur Vorlesung 7: 02.06.2023)

1. Die AB-Stoßrate in einer Gasmischung (A,B) ist durch $\sigma u_{n_{AB}}$ gegeben, mit $u = (8k_B T / \pi \mu)^{1/2}$ - mittlerer relativer Geschwindigkeit und μ - reduzierter Masse. Berechnen Sie die AB- und AA-Stoßraten (A = H₂) für eine 1:1 Mischung aus H₂ und N₂ (B; gleiche Dichte) bei einem Gesamtdruck von 1 bar und einer Temperatur von 300 K. Nehmen Sie das Harte-Kugel-Modell und einen Moleküldurchmesser sowohl für H₂ als auch für N₂ von 3 Å. Vergessen Sie nicht, die AA-Stoßrate für die doppelte Zählung jedes Stoßes zu korrigieren.

(4 Pkte.)

2. Berechnen Sie die Stoßrate der N₂-Moleküle mit der obersten Lage einer Oberfläche unter Normalbedingungen (1 bar Druck und 25° C). Die Oberflächenatome sind in einem Quadratgitter mit dem Abstand 3 Å angeordnet. Der Stoßquerschnitt der Oberflächenatome bezogen auf die N₂-Moleküle betrage $0,9 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$.

(Hinweis: Betrachten Sie dazu vereinfachend nur senkrecht auf die Wand auftreffende Moleküle und nehmen Sie eine einheitliche mittlere Geschwindigkeit der Moleküle an.)

(4 Pkte.)

3. Betrachten Sie das effektive Potential für die Annäherung von zwei Stoßpartnern $E_{\text{pot}}^{\text{eff}}(r) = \frac{1}{2} \mu v_0^2 \frac{b^2}{r^2} + E_{\text{pot}}(r)$ mit der reduzierten Masse μ , der Anfangsgeschwindigkeit der Teilchen v_0 (für $r \rightarrow \infty$) und dem Stoßparameter b . Nehmen Sie für $E_{\text{pot}}(r)$ folgendes attraktives Potential an: $E_{\text{pot}}(r) = -\frac{c}{r^6}$

a) Für molekularen Stickstoff beträgt die Konstante $c = 1,4 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{nm}^6$. Berechnen Sie entsprechend die Position r_{ZB} des Maximums der Zentrifugalbarriere und die Höhe des Potentialwalls für $b = 0, 4, \text{ und } 40 \text{ \AA}$ unter Normalbedingungen (1 bar Druck und 25° C).

b) Zeichnen Sie schematisch den Verlauf des effektiven Potentials für die unter (a) angegebenen Bedingungen ($b = 0, 4, \text{ und } 40 \text{ \AA}$).

Ziehen Sie in Betracht, dass Sie nicht die absolute, sondern relative mittlere Geschwindigkeit berechnen sollen, weil es um den Stoß der zwei Stickstoffmoleküle geht. Die absolute mittlere Geschwindigkeit wurde früher, in der Aufgabe 2, gerechnet.

(4 Pkte.)