

Übungsblatt 12 (Aufgabe 38 bis 28.01.2019, Aufgaben 39-40 bis 04.02.2019)**Aufgabe 38: Energieabhängigkeit des Streuquerschnitts bei attraktivem Potential**

Betrachten Sie noch einmal das Ergebnis von Aufgabe 34 (Viskosität und Diffusion im idealen Gas). Die erwartete Linearität in den Auftragungen wird durch die Daten für die Viskosität und den Diffusionskoeffizienten in den betrachteten Temperaturintervallen sehr gut erfüllt. Prüfen Sie, ob auch die jeweiligen Achsenabschnitte die Erwartungen aus den Gleichungen erfüllen. Versuchen Sie, mögliche Abweichungen von der Theorie zu erklären. Berücksichtigen Sie dabei vor allem die Abhängigkeit des intermolekularen Wechselwirkungspotentials von der kinetischen Energie der Moleküle im Fall attraktiver Wechselwirkungen.

Aufgabe 39: Newton-Diagramm für elastische Streuung

Ein Argon-Atomstrahl ($M = 40$) trifft unter einem Winkel von 90° auf einen Strahl auf Kryptonatomen ($M = 84$), wobei Ar- und Kr-Atome dieselbe Geschwindigkeit haben. Berechnen Sie den Laborwinkel zwischen der Krypton-Richtung und der Richtung, in der ein Detektor positioniert werden muss, um elastisch rückwärts gestreute Kr-Atome zu detektieren (Rückwärtsstreuung in Bezug auf das Schwerpunktskoordinatensystem). Hinweis: Zeichnen Sie ein Newton-Diagramm für die Kollision. Beachten Sie, dass bei elastischer Streuung die Produktgeschwindigkeit von Krypton die Oberfläche einer Kugel beschreibt, deren Radius dem ursprünglichen Geschwindigkeitsvektor von Kr entspricht. Ermitteln Sie den gesuchten Winkel graphisch oder durch eine geometrische Berechnung.

Aufgabe 40: Position des Übergangszustands auf der Potentialhyperfläche

Die Abbildung zeigt die Potentialfläche für das System Cl-H-Br bei kollinearer Annäherung der Reaktionspartner (linearer Übergangszustand). Die Konturlinien geben die Energie in kcal/mol an; der schwarze Punkt markiert die Position des Übergangszustands. Betrachten Sie nun die Reaktion $\text{Cl} + \text{HBr} \rightarrow \text{ClH} + \text{Br}$ und geben Sie an, ob vorwiegend translatorische oder vibratorische Anregung für die Reaktion vorteilhaft ist. Erwarten Sie bei dieser Reaktion für die Produkte eher translatorische oder vibratorische Anregung? Diskutieren Sie in gleicher Weise die Rückreaktion $\text{Br} + \text{HCl} \rightarrow \text{BrH} + \text{Cl}$ und skizzieren Sie für beide Fälle jeweils eine typische Trajektorie für vorteilhafte und unvorteilhafte Anregung auf der Eduktseite! (Daten aus: M. Broida, A. Persky, Chem. Phys. 133 (1989) 405.)

