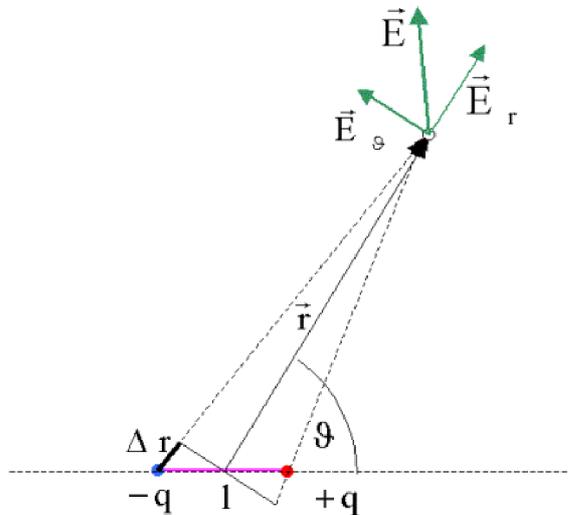


1. Atomabstand und Schwingungsfrequenz in Molekülen

- (a) Die charakteristische Rotationsenergie B des N_2 -Moleküls beträgt $2,48 \cdot 10^{-4}$ eV. Berechne damit den Abstand der Stickstoffatome im Molekül.
- (b) Der Abstand der Atome im O_2 -Molekül ist in Wirklichkeit etwas grösser als der in Beispiel 38.3 in Tipler angenommene Wert von 0,1 nm, und die charakteristische Rotationsenergie beträgt nicht $2,59 \cdot 10^{-4}$ eV, sondern $1,78 \cdot 10^{-4}$ eV. Berechne damit den Abstand der Sauerstoffatome im Molekül.
- (c) Die Kraftkonstante des HF-Moleküls beträgt 970 N/m. Welche Schwingungsfrequenz hat das HF-Molekül?

2. Van der Waals Wechselwirkung



Das elektrische Potential einer Ladung q ist gegeben durch

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r}. \quad (1)$$

- (a) Berechne das Potential $\phi(r, \theta)$ eines Dipols $\vec{p} = q \cdot \vec{l}$ unter Verwendung der Näherung $l \ll r$, bzw. $\Delta r \ll r$.

- (b) Berechne die Radialkomponente, die Azimutalkomponente und den Betrag des elektrischen Feldes $\vec{E}(r, \theta)$ eines Dipols mittels

$$\vec{E}(r, \theta) = -\vec{\nabla}\phi(r, \theta) = -\frac{\partial\phi}{\partial r}\vec{e}_r - \frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\vec{e}_\theta. \quad (2)$$

Ein Atom mit Dipol \vec{p}_1 kann in einem anderen Atom einen Dipol $\vec{p}_2 = \alpha E_1$ induzieren, wobei α die Polarisierbarkeit des Atoms, und r die Distanz zwischen beiden Atomen ist.

- (c) Zeige unter Verwendung von $U = -\vec{p} \cdot \vec{E}$ wie die Wechselwirkungsenergie U_{VdW} zwischen \vec{p}_1 und \vec{p}_2 von r abhängt.

3. Lennard-Jones-Potential

Das Lennard-Jones-Potential beschreibt das Potential U als Funktion des Abstandes r zwischen zwei durch Van der Waals Wechselwirkung gebundenen Atomen. Es ist gegeben durch:

$$U = 4U_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (3)$$

Der Term mit $1/r^{12}$ ist eine phänomenologische Annäherung der abstossenden Kraft zwischen den Elektronenhüllen der Atomen.

- (a) Diskutiere das Lennard-Jones-Potential anhand einer Skizze. Was sind die interessanten Fragestellungen?
- (b) Bestimme das Minimum.
- (c) Berechne die effektive Federkonstante für Schwingungen um das Minimum für $\sigma = 0.3 \text{ nm}$ und $U_0 = 1 \cdot 10^{-21} \text{ J}$ (typische Werte für Edelgase).
Hinweis: Führe eine Taylorentwicklung des Potentials durch.