Institut für Physikalische Chemie
M. Olzmann / J. Kiecherer

Übungsaufgaben zur Wahlpflichtvorlesung Reaktionskinetik SS 2013

Blatt 4

Aufgabe 11

Ein Massenpunkt der Masse m schwinge in einem Potential der Form $V(q) = kq^2$. Schreiben Sie die Hamilton-Funktion auf und bestimmen Sie die zeitlichen Verläufe des Impulses $p(t)$ und der Ortskoordinate $q(t)$ durch Lösen der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen. Nehmen Sie als Anfangsbedingung $p(t=0) = 0$ und $q(t=0) = q_0 \neq 0$ an. Zeichnen Sie die Bahnkurve (Trajektorie) für zwei verschiedene Gesamtenergien E_1 und E_2 ($E_1 < E_2$) in ein p-q-Diagramm (Phasenraum). Durchdenken Sie den Sachverhalt und die Darstellung.

Aufgabe 12

Die potentielle Energie einer kovalenten Bindung wird häufig durch das Morse-Potential angenähert:

$$V_M(r) = D_e \{ 1 - \exp[-\beta(r-r_e)]\}^2$$

mit den Parametern D_e, β und r_e.

a) Skizzieren Sie $V_M(r)$ und machen Sie sich die Bedeutung der Parameter klar.
b) Bestimmen Sie in harmonischer Näherung Frequenz und Wellenzahl der Schwingung in $H^{35}Cl$ (D_e = 440,2 kJ mol^{-1}, $\beta = 1{,}81 \cdot 10^{10}$ m^{-1}).

Aufgabe 13

Leiten Sie aus der Eyring-Gleichung

$$k(T) = \frac{k_B T}{h} \frac{Q^{\ddagger}}{Q} \exp\left(-\frac{E_0}{k_B T}\right)$$

einen Ausdruck für die Aktivierungsenergie ab und interpretieren Sie die einzelnen Beiträge.