

**Themenschwerpunkt A****Atom- und Molekülphysik****Aufgabe 1: Moleküldynamik Alkali-Halogenide**

- a) Die Grundsicherungen der Wasserstoff-Halogenidmoleküle HF, HCl, HBr haben die folgenden Frequenzen:  $f_{\text{H}^{19}\text{F}} = 125,5 \text{ THz}$ ,  $f_{\text{H}^{35}\text{Cl}} = 90,5 \text{ THz}$ ,  $f_{\text{H}^{81}\text{Br}} = 80,3 \text{ THz}$ . Berechnen Sie die zugehörigen Werte der Kraftkonstanten  $k$  und erklären Sie den Trend. (4 Punkte)
- b) Berechnen Sie für HCl den Gleichgewichtsabstand  $R_0$  der Ionen unter der Annahme, dass sich die Rückstellkraft bei einer Dehnung anhand der Abstandsabhängigkeit der Coulombkraft des  $\text{H}^+$  und des  $\text{Cl}^-$ -Ions darstellen lässt. (4 Punkte)
- c) Skizzieren Sie das harmonische Potenzial sowie das tatsächliche Bindungspotenzial der Moleküle und begründen Sie die Unterschiede. Geben Sie die Formel für ein Potenzial an, das das tatsächliche Bindungspotenzial besser beschreibt. (4 Punkte)
- d) Berechnen Sie für HCl aus der Schwingungsfrequenz die Nullpunktenergie, die sich nach dem Modell des quantenmechanischen harmonischen Oszillators ergibt und nennen Sie die Ursache dieser Nullpunktsschwingung.  
Bestimmen Sie die Anzahl der Energieniveaus dieses harmonischen Oszillators bis zur Höhe der gemessenen Dissoziationsenergie  $D = 4,43 \text{ eV}$ . Berechnen Sie die Auslenkungsamplitude, die sich nach diesem Modell bei der Dissoziationsenergie ergibt. (5 Punkte)
- e) Die Quantisierung von Molekülrotationen lässt sich ähnlich zum Bohrschen Atommodell quasi-klassisch über die Drehimpulsquantisierung  $L = n\hbar$  beschreiben.  
Berechnen Sie nach diesem Modell die Rotationsfrequenz für ein starres HCl-Molekül. Benutzen Sie hierzu den experimentell bestimmten Atomabstand  $R_0 = 1,28 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ . (3 Punkte)

Fortsetzung nächste Seite!