

**Teilaufgabe 2: HCl-Molekül**

(20 Punkte)

Im HCl-Molekül haben H und Cl den Gleichgewichtsabstand  $r_0 = 0,127$  nm. Die Wechselwirkungsenergie zwischen ihnen im Abstand  $r$  kann näherungsweise durch das sog. Morse-Potential

$$W_M(r) = W_D [1 - e^{-a(r-r_0)}]^2$$

beschrieben werden, wobei  $W_D = 4,44$  eV die Dissoziationsenergie des Moleküls ist und  $a = 1,81 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$  beträgt.

- a) Zeigen Sie, dass sich für genügend kleine Auslenkungen aus der Gleichgewichtslage ein harmonisches Wechselwirkungspotential ergibt. Berechnen Sie für diesen Fall die Kraftkonstante  $D$  und die Schwingungsfrequenz  $\omega$ . Bestimmen Sie auch die Energie der Nullpunktsschwingung und die zugehörige Schwingungsamplitude. (8 Punkte)  
(Ersatzlösungen:  $D = 500 \text{ N/m}$ ;  $\omega = 5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ).
- b) Nehmen Sie nun das Molekül zunächst als starr an und betrachten Sie seine Rotationen um eine Achse senkrecht zur Verbindungsachse der Atome und durch den molekularen Schwerpunkt. Bestimmen Sie für diesen Fall die ersten 3 Anregungsniveaus dieser Rotationen. Berechnen Sie für das 1. Anregungsniveau auch die Rotationsfrequenz. (6 Punkte)
- c) Wie in a) berechnet, ist das Molekül natürlich nicht starr. Aufgrund der Zentrifugalkraft bei der Rotation ändert sich der Atomabstand bei der Rotation. Berechnen Sie zunächst diese Änderung und benutzen Sie diese, um die zugehörige Energieänderung des 1. Anregungszustands der Rotation zu ermitteln. (6 Punkte)

Fortsetzung nächste Seite!