

Aufgabe 42

Skizzieren Sie je eine typische Potentialkurve für ein kovalent gebundenes Molekül und ein van der Waals-Molekül.

Aufgabe 43

Analysieren Sie das unter anderem für zwei-atomige Moleküle gebräuchliche erweiterte

Born-Mayersche-Potential (mit $z = 1$):
$$W_{\text{eBM}}(r) = -\frac{e^2 z^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \beta_1 \cdot e^{-r/\rho_1} - \frac{d}{r^6} .$$

- a) Wie berechnet man den Gleichgewichtsabstand r_e , die „Dissoziationsenergie“ $D_e(r_e)$ und die Federkonstante $k_e = k_e(r_e) = \left(\frac{d^2 W}{dr^2} \right)_{r=r_e}$?
- b) Diskutieren Sie das Verhalten für $r \rightarrow 0$ und $r \rightarrow \infty$.
- c) Bestimmen Sie r_e , D_e und k_e am Beispiel LiF mit $\rho_1 = 0,308 \text{ \AA}$, $\beta_1 = 895 \text{ eV}$ und $d = 2,68 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^6$. Skizzieren Sie die Funktion.

Aufgabe 44

Für HCl kann das Morse-Potential $W = D(1 - e^{-a(r-r_0)})^2$ verwendet werden. Leiten Sie hieraus die Schwingungsfrequenz ω_0 ab.

Die Klausur findet am Mittwoch, den 14. Juli um 14 Uhr im Gerthsen-Hörsaal statt. Hilfsmittel sind nicht zugelassen. Rückgabe der Klausur und Ausgabe der Scheine am 20.07. im Tutorium.

Die Nachklausur wird voraus. am Nachmittag des 19. Oktobers stattfinden.

Am 13. und 20. Juli finden die Tutorien 6 (Gernot Riedel, 1400-1530, sonst 11/12) und 8 (Thorsten Scheidle, 1400-1530, sonst 12/12) im Seminarraum 6-1 statt. Das Tutorium 7 (Stephan Leyer, 1400-1530, sonst 12/1) wird an diesen Terminen in den kleinen Hörsaal A verlegt.