

Besprechung am 14.07.2017

Übungsblatt 10

1) Zustandssumme der Rotation

Betrachten Sie gasförmiges HI bei einer Temperatur von $T = 400$ K.

- Berechnen Sie die charakteristische Rotationstemperatur θ_{rot} bei einer Bindungslänge von $r = 161$ pm. Nehmen Sie für die Atommassen von H und I $m_H = 1$ u und $m_I = 127$ u an. Unter welcher Bedingung gilt die Hochtemperaturnäherung der Rotation? Ist diese hier erfüllt? Berechnen Sie außerdem die Zustandssumme q_{rot} .
- Berechnen Sie die mittlere Energie $\bar{\epsilon}_{rot}$ eines HI Moleküls bei $T = 400$ K.
- Die Besetzungswahrscheinlichkeit $p(J)$ eines jeden Rotationsenergieniveaus ist definiert als:

$$p(J) = (2J + 1)e^{-\frac{\theta_{rot}}{T}J(J+1)} \cdot \frac{1}{q_{rot}}$$

Welches Energieniveau ist bei einer Temperatur von $T = 400$ K für HI am häufigsten besetzt? Leiten Sie hierfür einen Ausdruck für J_{max} aus obiger Gleichung ab.

2) Zustandssumme der Vibration

- NO weist eine Grundschiwingung bei $\tilde{\nu} = 1904$ cm^{-1} auf. Berechnen Sie die Zustandssumme der Vibration q_{vib} für NO bei 300 K. Tragen Sie die Zustandssumme q_{vib} für $\tilde{\nu} = 1904$ cm^{-1} gegen die Temperatur auf. Wie verhält sich q_{vib} bei hohen Temperaturen?
- Berechnen Sie die Besetzungswahrscheinlichkeit p_v für $v = 0, 1$ und 2 für NO bei einer Temperatur von 300 K.
- Finden Sie geeignete Näherungen der Vibrationszustandssumme von NO bei sehr hohen und sehr niedrigen Temperaturen.
- Wie lautet die Zustandssumme der Vibration von Wasser, welches drei Grundschiwingungen bei $\tilde{\nu}_1 = 1595$ cm^{-1} , $\tilde{\nu}_2 = 3652$ cm^{-1} und $\tilde{\nu}_3 = 3756$ cm^{-1} besitzt? Berechnen Sie diese für eine Temperatur von 800 K.

Besprechung am 14.07.2017

3) Molekulare Zustandssumme

Betrachten Sie das Molekül ${}^1\text{H}{}^{19}\text{F}$ bei einer Temperatur von $T = 298\text{ K}$. Die Rotations- und Schwingungskonstanten betragen $B = 20,56\text{ cm}^{-1}$ und $\tilde{\nu} = 3959\text{ cm}^{-1}$. Der elektronische Grundzustand ist einfach entartet. Angeregte elektronische Zustände sowie die Nullpunktsenergie können vernachlässigt werden. Das Teilchen nimmt ein Volumen von 1 cm^3 ein.

- a) Berechnen Sie die molekulare Zustandssumme von ${}^1\text{H}{}^{19}\text{F}$.
- b) Vergleichen Sie ${}^1\text{H}{}^{19}\text{F}$ mit ${}^{19}\text{F}_2$ wobei $\tilde{\nu}({}^{19}\text{F}_2) = 920\text{ cm}^{-1}$ und $B({}^{19}\text{F}_2) = 0,88\text{ cm}^{-1}$. Wie verändert sich die molekulare Zustandssumme? Begründen Sie.