

Besprechung am 06.07.2018

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} .
- 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 800 K.
- Finden Sie geeignete Näherungen der Vibrationszustandssumme von NO bei sehr hohen und sehr niedrigen Temperaturen.
- Wie lautet dagegen 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.

3) Molekulare Zustandssumme von Sauerstoff

Betrachten Sie 1 mol molekularen Sauerstoff bei einer Temperatur von 3000 K und einem Druck von 1 bar. Der Bindungsabstand von O_2 wurde mittels Computersimulationen auf 121 pm berechnet. Die Grundschiwingungskonstante $\tilde{\nu}$ wurde über IR-Spektroskopie ermittelt zu $\tilde{\nu} = 1556,3$ cm^{-1} . Es ist weiterhin bekannt, dass der elektronische Triplett-Grundzustand dreifach entartet ist. Angeregte Singulett-Zustände (jeweils einfach entartet) liegen bei $0,97$ und $1,63$ eV.

- Berechnen Sie die molekulare Zustandssumme und die Komponenten aus denen die molekulare Zustandssumme zusammengesetzt wird. Betrachten Sie hierfür explizit *alle* Komponenten.

Besprechung am 06.07.2018

- b) Leiten Sie einen allgemeinen Ausdruck für die mittlere Energie $\bar{\epsilon}$ der einzelnen Komponenten sowie der molekularen Zustandsstümme ab und berechnen Sie $\bar{\epsilon}$ explizit für eine Temperatur von 500 K. Vernachlässigen Sie für diesen Aufgabenteil die mittlere Energie die Elektronenanregung.
- c) Sind Ihre Ergebnisse im Einklang mit dem Gleichverteilungssatz? Begründen Sie.