

Besprechung am 12.07.2019

Übungsblatt 10

1) Besetzungsverhältnis und elektronische Zustandssumme

In einem Gas-Molekül sei der elektronische Grundzustand 2-fach entartet. Der elektronisch angeregte Zustand sei 4-fach entartet. Die Energiedifferenz des 2-Niveau-Systems betrage 300 cm^{-1} .

- Wie lautet die allgemeine Zustandssumme für das gegebene 2-Niveau-System und die jeweilige Besetzungswahrscheinlichkeit der zwei elektronischen Zustände? Wie groß ist die Zustandssumme und die jeweilige Besetzungswahrscheinlichkeit für $T \rightarrow \infty$ und für $T \rightarrow 0$? Nehmen Sie für den elektronischen Grundzustand eine Energie von $\varepsilon_0 = 0$ an.
- Berechnen Sie das Besetzungsverhältnis N_0/N_1 bei $T = 300 \text{ K}$ und $T = 3000 \text{ K}$.
- Ab welcher Temperatur ist der elektronisch höher liegende Zustand (angeregter Zustand) stärker besetzt?

2) Zustandssumme der Translation

- Berechnen Sie die Zustandssumme der Translation für ein Neonatom in einem Würfel mit 5 cm Kantenlänge bei den Temperaturen
 - 20°C ,
 - 250°C .
- Berechnen Sie die mittlere Energie $\bar{\varepsilon}_{trans}$ eines Neonatoms ausgehend von der Zustandssumme der Translation für die oben genannten Temperaturen.
- Wie groß ist das Verhältnis der Zustandssummen der Translation von Aceton ($(\text{CH}_3)_2\text{CO}$) und deuteriertem Aceton ($(\text{CD}_3)_2\text{CO}$) für identische Temperaturen und Volumina?

3) Thermische de-Broglie Wellenlänge

- Berechnen Sie die de-Broglie Wellenlänge Λ eines Argonatoms und vergleichen Sie diese mit der mittleren freien Weglänge λ bei einer Temperatur von 300 K und einem Druck von 1 bar, wenn Sie einen Durchmesser von $d = 70 \text{ pm}$ annehmen. Müssen für Argon unter diesen Bedingungen Quanteneffekte berücksichtigt werden?
- Bei sehr niedrigen Temperaturen ist ein Abweichen von der klassischen Boltzmann-Statistik zu beobachten. Gase werden dann quantenmechanisch durch die Bose-Einstein- oder Fermi-Dirac-Statistik beschrieben. Welche Bedingung gilt bei der kritischen Phasenübergangstemperatur T_c für ebendiesen Übergang? Geben Sie eine kurze physikalische Deutung dieser Bedingung.

Besprechung am 12.07.2019

4) Zustandssumme der Rotation

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

- a) 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} .
- b) 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.