

ÜBUNGSAUFGABEN 3

1. Berechnung der molaren Entropie

Berechnen Sie die molare Entropie von ClO_2 bei Raumtemperatur. Die Bindungslänge einer ClO-Bindung im ClO_2 -Molekül beträgt 149 pm. Der O-Cl-O-Winkel ist $118,5^\circ$. Das Molekül besitzt die Punktgruppe C_{2v} und einen elektronischen Grundzustand vom Typ 2B_1 .

Nehmen Sie für die Berechnung an, dass Sie bei der betrachteten Temperatur den Beitrag der Schwingungen sowie den der elektronisch angeregten Zustände vernachlässigen können. Behandeln Sie ClO_2 zudem als starren Rotator.

2. Berechnung der Wärmekapazität

CO_2 (Bindungsabstand 116,3 pm) liegt in einen Singulett-Grundzustand vor. Es besitzt eine symmetrische Streckschwingung vom Typ Σ_g^+ mit $\tilde{\nu} = 1340 \text{ cm}^{-1}$, eine asymmetrische Streckschwingung vom Typ Σ_u^+ mit $\tilde{\nu} = 2349 \text{ cm}^{-1}$ und eine Knickschwingung vom Typ Π_u mit $\tilde{\nu} = 667 \text{ cm}^{-1}$.

- Berechnen und zeichnen Sie die molare isochore Wärmekapazität \bar{C}_V (bei Standarddruck) als Funktion der Temperatur im Bereich von 0 K bis 1200 K. Verwenden Sie die harmonische Näherung, vernachlässigen Sie elektronische Anregungen und nehmen Sie an, CO_2 verhalte sich wie ein starrer Rotator.
- Kennzeichnen Sie die Temperaturbereiche, in denen die von Ihnen berechnete Wärmekapazität Gültigkeit besitzt.
- Vergleichen Sie das in a) erhaltene Ergebnis mit möglichst vielen verschiedenen Literaturwerten. Beachten Sie dabei die Herkunft der Literaturwerte (aus kalorimetrischen Messungen, spektroskopischen Bestimmungen etc.)