

Übungen zur Vorlesung „Statistische Thermodynamik und Gaskinetik“

Blatt 2

Aufgabe 1:

Berechnen Sie im Rahmen der harmonischen Näherung (alle Schwingungsniveaus haben konstante Abstände) den Anteil von I_2 -Molekülen, die bei 25°C im Schwingungsgrundzustand und in den ersten fünf angeregten Zuständen sind. Die Wellenzahl der Schwingung beträgt $\tilde{\nu} = 214.6 \text{ cm}^{-1}$.

Bei welcher Temperatur ist die Besetzung des ersten angeregten Zustandes (a) halb so groß wie die des Grundzustandes, (b) genau so groß wie die des Grundzustandes?

Aufgabe 2:

Telluratome besitzen energetisch niedrig liegende angeregte Zustände. Berechnen Sie die (elektronische) Zustandssumme der Atome (a) bei 298 K und (b) bei 5000 K aus den folgenden spektroskopischen Daten: Grundniveau (fünffach entartet) angeregte Zustände bei: 4751 cm^{-1} (dreifach entartet), 4707 cm^{-1} (nicht entartet) und 10559 cm^{-1} (fünffach entartet).

Aufgabe 3:

In Aufgabe 1 haben Sie die harmonische Näherung verwendet. In der Praxis findet man für die Schwingungsniveaus von I_2 -Molekülen die folgenden Wellenzahlen bezogen auf die Energie der Nullpunktsschwingung: 213.30 cm^{-1} , 425.39 cm^{-1} , 636.27 cm^{-1} , 845.93 cm^{-1} , 1054.38 cm^{-1} . Berechnen Sie die Schwingungszustandssumme durch direktes aufsummieren (a) bei 100 K und (b) bei 25°C .

Aufgabe 4:

Wie groß sind die Anteile der Jod-Moleküle bei den beiden in der letzten Aufgabe angegebenen Temperaturen im Grundzustand sowie in den ersten beiden angeregten Zuständen? Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse mit den aus der harmonischen Näherung (Aufgabe 1) erhaltenen Resultaten.