

Übungen zur Vorlesung „Statistische Thermodynamik und Gaskinetik“

Blatt 6

Aufgabe 1:

Die Symmetriezahl σ lässt sich berechnen, indem man die Anzahl der ununterscheidbaren Orientierungen des Moleküls, die man durch Rotations-Symmetrieoperationen erreichen kann, abzählt. Wie groß ist dieser Wert (a) für N_2 , (b) für NO, (c) für Benzol, (d) für Methan und (e) für Chloroform?

Aufgabe 2:

Berechnen Sie die Rotationszustandssumme des HCl-Moleküls ($B=10.59 \text{ cm}^{-1}$) (a) bei 100 K, (b) bei 298 K und (c) bei 500 K.

Aufgabe 3:

Die Bindungslänge im Sauerstoffmolekül beträgt 120.75 pm. Berechnen Sie die Rotationszustandssumme für 300 K.

Aufgabe 4:

Berechnen Sie die Rotationszustandssumme des Ethens bei 25°C ($A = 4.828 \text{ cm}^{-1}$, $B = 1.0012 \text{ cm}^{-1}$, $C = 0.8282 \text{ cm}^{-1}$)

Aufgabe 5:

Die drei Normalschwingungen des Wassermoleküls haben die Wellenzahlen 3656.7 cm^{-1} , 1594.8 cm^{-1} und 3755.8 cm^{-1} . Berechnen Sie die Schwingungszustandssumme bei 1500 K.

Aufgabe 6:

Ein bestimmtes Atom habe einen doppelt entarteten Grundzustand und einen angeregten, vierfach entarteten Zustand bei 450 cm^{-1} . In einem Molekularstrahlexperiment wurde beobachtet, dass 30% der Atome im oberen Zustand sind und die Translationsstemperatur 300 K beträgt. Sind die elektronischen Zustände der Atome im thermischen Gleichgewicht mit den Translationszuständen?