

5. Übungsblatt zur PC II, Statistik und Kinetik (WS 2006/07)
Prof. Brutschy

Ausgabe: 14.11.2006

Abgabe: 21.11.2006

Aufgabe 1 (Entropie von Gasen)

(3 Punkte)

- a) Berechnen Sie die molare Entropie für Helium und Xenon bei $T = 298.15$ K und einem Druck von 1 bar mittels der *Sackur-Tetrode-Gleichung*.
- b) Berechnen Sie die molare Entropieänderung bei der Mischung eines Volumens Helium (V) und eines Volumens Xenon (V) zum Gesamtvolumen ($2 \cdot V$), wobei p und T konstant seien. Was ergibt sich unter gleichen Bedingungen für das Mischen von Argon mit Neon?

Aufgabe 2 (Rotationszustandssumme)

(4 Punkte)

Für die Zustandssumme der Rotation eines zweiatomigen Moleküls gilt:

$$z_{rot} = \sum_{J=0}^{\infty} (2J+1) \cdot \exp\left(\frac{-\theta_{rot} J(J+1)}{T}\right) \text{ mit } J = 0, 1, 2, \dots$$

Hierbei ist J die Rotationsquantenzahl und $\theta_{rot} = \frac{\hbar^2}{2Ik_B}$ die Rotationskonstante, welche von dem Trägheitsmoment I des Moleküls abhängt.

- a) Leiten Sie den Ausdruck für die Zustandssumme in der „Hochtemperatur-Näherung“ her ($\theta_{rot} \ll T$). Ersetzen Sie dazu die Summe durch eine Integration.
- b) Zeigen Sie, dass der wahrscheinlichste Rotationszustand gegeben ist durch:

$$J_{max} \approx \left(\frac{T}{2\theta_{rot}}\right)^{1/2} - \frac{1}{2}.$$

Hinweis: Betrachten Sie J als kontinuierliche Variable.

- c) Berechnen Sie die Besetzungszahl der Rotationszustände mit $J = J_{max}$ und $J = 0$ bei $T = 300$ K für das zweiatomige Gas NO unter der Annahme, dass die Hochtemperatur-Näherung gilt. Verwenden Sie hierzu $\theta_{rot} = 2.39$ K.
- d) Berechnen Sie mit Hilfe der Zustandssumme aus a) den Rotationsbeitrag der freien Energie, der Entropie, der inneren Energie und der spezifischen Wärmekapazität $C_{V,rot}$ bei 300 K.

b.w.

Aufgabe 3 (Einstein'scher Kristall)

(3 Punkte)

Ein Atomkristall kann als System von N unterscheidbaren Teilchen aufgefasst werden, wobei sich jedes Teilchen wie ein dreidimensionaler harmonischer Oszillator verhält (*Einstein'scher Kristall*). Da alle Gitterplätze identisch sind, schwingt jedes Atom mit derselben Frequenz ν .

- a) Zeigen Sie, ausgehend von der molekularen Zustandssumme eines harmonischen Oszillators $z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+\frac{1}{2})h\nu}$, dass die Zustandssumme des Kristalls mit N Atomen gegeben ist durch:

$$Z = e^{-\beta U_0} \left(\frac{e^{\frac{\beta h\nu}{2}}}{1 - e^{-\beta h\nu}} \right)^{3N}.$$

Dabei ist U_0 die Nullpunktsenergie.

Hinweis: $\sum_{t=0}^{\infty} x^t = \frac{1}{1-x}$

- b) Leiten Sie aus der Zustandssumme Z den Ausdruck für die mittlere Energie und für die molare Wärmekapazität C_V her. Wie groß ist C_V für Diamant bei $T = 1000$ K ($\nu = 2.75 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$)?