

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

Ausgabe: 21.11.2006

Abgabe: 28.11.2006

Aufgabe 1 (Entropie eines Gases)

(4 Punkte)

- a) Leiten Sie aus der Zustandssumme eines zweiatomigen idealen Gases

$$z = V \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{T}{\theta_{rot}} \cdot \frac{e^{-\frac{\theta_v}{2T}}}{1 - e^{-\frac{\theta_v}{T}}}$$

den Ausdruck für die molare Entropie her.

- b) Berechnen Sie die molare Entropie aus der Zustandssumme in a) von HBr (g) bei 298.15 K und 1 bar. Die Vibrations- und Rotationskonstante für HBr (g) ist $\nu/c = 2648 \text{ cm}^{-1}$ bzw. $B/c = 8.4 \text{ cm}^{-1}$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem experimentellen Wert von $198.7 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

Hinweis: Verwenden Sie $B/c = h/(8Ic\pi^2)$, wobei c die Lichtgeschwindigkeit und I das Trägheitsmoment des Moleküls ist.

Aufgabe 2 (Wärmekapazität)

(3 Punkte)

Bei 20 K ist die molare Wärmekapazität von Kupfer 0.48 J/K . Berechnen Sie zunächst mit Hilfe des Debyeschen T^3 -Gesetzes die Debye-Temperatur Θ_D . Bestimmen Sie dann den Wert der molaren Wärmekapazität bei 300 K. Gehen Sie von der folgenden Gleichung für die molare innere Energie aus:

$$U = \frac{9}{8} R \cdot \Theta_D + 9RT \cdot \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \cdot \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx, \quad \text{mit } x = \frac{h\nu}{k_B T}$$

Hinweis: $\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = 6.495$. Nehmen Sie an, dass $T \rightarrow \infty$ für $T = 300 \text{ K}$ und $T \rightarrow 0$ für

$T = 20 \text{ K}$

Aufgabe 3 (Einatomiges ideales Gas)

(3 Punkte)

- a) Welche Freiheitsgrade tragen zu der molaren inneren Energie und der molaren Wärmekapazität eines einatomigen idealen Gases bei?
- b) Berechnen Sie die molare innere Energie und die molare Wärmekapazität aus den Zustandssummen der genannten Freiheitsgrade für F und Br bei 1000 K. F^{19} und Br^{79} weisen zwei Spin-Bahn-Zustände im Abstand von 394 cm^{-1} bzw. 3685 cm^{-1} auf. Der Entartungsgrad des niedrigeren Zustandes ist $g_0 = 4$, der des höheren Zustandes ist $g_1 = 2$.