

Besprechung am 19.07.2019

Übungsblatt 11

1) Zustandssumme der Vibration von Wasser

Wasser ist ein täglich in vielfacher Form anzutreffender Begleiter des Lebens. Das H_2O -Molekül besitzt die Grundschnwingungen $\tilde{\nu}_1 = 1595 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{\nu}_2 = 3652 \text{ cm}^{-1}$ und $\tilde{\nu}_3 = 3756 \text{ cm}^{-1}$. Die Nullpunktsenergie ist vernachlässigbar.

- Wie lautet die Zustandssumme der Vibration von Wasser? Berechnen Sie diese für eine Temperatur von 1000 K.
- Welche Näherungen gelten für die Vibrationszustandssumme bei sehr hohen und sehr niedrigen Temperaturen? Gehen Sie für die Betrachtung von einem allgemeinen Fall mit nur einer Schwingung aus.

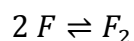
2) Molekulare Zustandssumme von Sauerstoff

Betrachten Sie 1 mol molekularen Sauerstoff bei einer Temperatur von 3000 K und einem Druck von 1 bar. Der Bindungsabstand von O_2 wurde mittels Computersimulationen auf 121 pm berechnet. Die Grundschnwingungskonstante $\tilde{\nu}$ wurde über IR-Spektroskopie ermittelt zu $\tilde{\nu} = 1556,3 \text{ cm}^{-1}$. Es ist weiterhin bekannt, dass der elektronische Triplett-Grundzustand dreifach entartet ist. Angeregte elektronische Singulett-Zustände (jeweils einfach entartet) liegen bei 0,97 und 1,63 eV.

- Berechnen Sie die molekulare Zustandssumme und die Komponenten aus denen die molekulare Zustandssumme zusammengesetzt wird. Betrachten Sie hierfür explizit *alle* Komponenten.
- Leiten Sie einen allgemeinen Ausdruck für die mittlere Energie $\bar{\epsilon}$ der einzelnen Komponenten sowie der molekularen Zustandssumme ab und berechnen Sie $\bar{\epsilon}$ explizit für eine Temperatur von 500 K. Für diesen Aufgabenteil ist die mittlere Energie der Elektronenanregung null.
- Sind Ihre Ergebnisse im Einklang mit dem Gleichverteilungssatz? Begründen Sie.

3) Systemzustandssumme, Entropie und Gleichgewichtskonstante

Im Folgenden wird die theoretische Bildung eines Fluor-Moleküls aus seinem Element bei 1000 K, 1 bar und für die Stoffmenge 1 mol betrachtet. Das System werde als ideales Gas angesehen.



- Berechnen Sie die molare Entropie $S_{m,trans}$ der Translation von F_2 nach der Sackur-Tetrode-Gleichung.

Besprechung am 19.07.2019

- b) Berechnen Sie außerdem in einer analogen Vorgehensweise die molare Entropie der Vibration $S_{m,vib}$ von F_2 . Die Grundschiwingung ist $\tilde{\nu} = 891,8 \text{ cm}^{-1}$. Beachten Sie, dass der Vorfaktor von $1/N!$ für die Systemzustandssumme Q nur bei der Translation berücksichtigt werden muss.
- c) Berechnen Sie die Gleichgewichtskonstante K . Folgende Daten sind aus experimentellen Untersuchungen zugänglich: $\theta_{rot,F_2} = 1,27 \text{ K}$ und $D_0 = 154,4 \text{ kJ mol}^{-1}$. Beachten Sie die Tatsache, dass der elektronische Grundzustand des Fluoratoms ein Dublett ist ($^2P_{3/2}$).