

Wird besprochen am 14. Januar 2022.

Aufgaben 1

Berechnen Sie die molare Freie Enthalpie für Wasserdampf bei 1500K und 10^5 Pa aus den spektroskopischen Daten:

Rotation

$$\tilde{A} = 27.878 \text{ cm}^{-1}; \tilde{B} = 14.5092 \text{ cm}^{-1}; \tilde{C} = 9.2869 \text{ cm}^{-1}$$

und die Normalschwingung:

$$\tilde{\nu}_1 = 3656.7 \text{ cm}^{-1}; \tilde{\nu}_2 = 1594.8 \text{ cm}^{-1}; \tilde{\nu}_3 = 3755.8 \text{ cm}^{-1}$$

Aufgaben 2

Berechnen Sie die mittlere Rotationsenergie für einen nicht linearen asymmetrischen Rotator.

Aufgaben 3

Berechnen Sie C_p für ein Mol J_2 -Dampf bei 298.15 K ($\tilde{\nu} = 214.36 \text{ cm}^{-1}$). (Der experimentelle Wert für C_p beträgt $36.90 \text{ JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$.) Wie groß ist C_p nach dem Gleichverteilungssatz, wenn eine vollständige Anregung der Schwingung vorliegt? Nehmen Sie an daß $C_p - C_v = R$, wie es exakt nur für ideale Gase gilt.

Aufgaben 4

Berechnen Sie die Molwärme C_p von Methan bei 25°C. Die Wellenzahlen der neun Normalschwingungen und ihre Entartungen (in Klammern) sind 2917 cm^{-1} (1), 1534 cm^{-1} (2), 3019 cm^{-1} (3) und 1306 cm^{-1} (3). (Der experimentelle Wert für C_p beträgt $35.31 \text{ JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$.)

Aufgaben 5

Mit Hilfe von statistischer Thermodynamik berechnen Sie die Entropie von gasförmigem N_2O (Struktur: $\text{N}=\text{N}=\text{O}$) beim Siedepunkt 184.8 K und Standarddruck 1 Bar.

$$B=0.419011 \text{ cm}^{-1}, \tilde{\nu}_1 = 1285.0 \text{ cm}^{-1}, \tilde{\nu}_2 = 588.8 \text{ cm}^{-1} (\text{doppelt entartet}), \tilde{\nu}_3 = 2223.5 \text{ cm}^{-1}.$$

Aufgaben 6

Zeigen Sie, daß das folgende Potential für die Wechselwirkung zwischen zwei Atomen zur Van-der-Waals Zustandsgleichung führt.

$$E_{pot} = \infty \text{ für } 0 \leq r \leq \sigma$$

$$E_{pot} = \epsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \text{ für } \sigma < r < \infty \text{ und } \epsilon \ll kT$$

Was sind die Werte für die Wan-der-Waals Koeffizienten?