

## Übungsblatt 4

### Aufgabe 4.1 (Entropie und Wärmekapazität mehratomiger Moleküle)

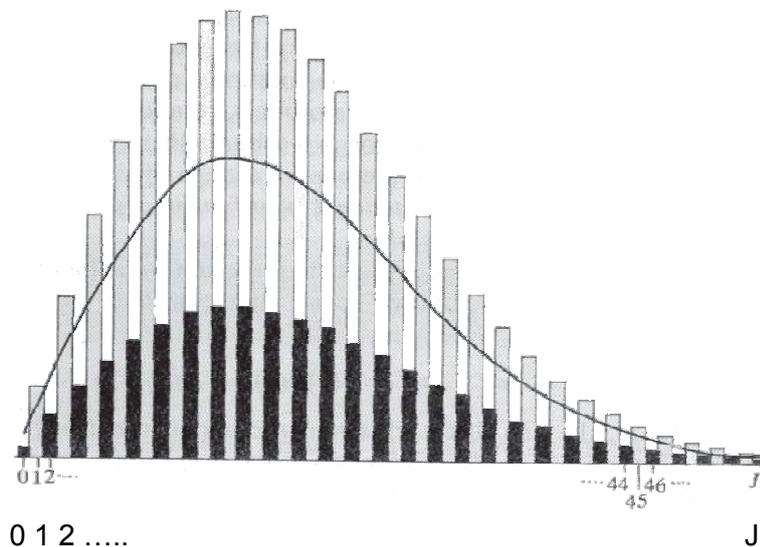
1 mol  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  sei bei Normaldruck in einem entsprechenden Gefäß gelagert. Die Schwingungsenergien des linearen Moleküls betragen  $1388,2\text{ cm}^{-1}$ ,  $667,4\text{ cm}^{-1}$  und  $2349,2\text{ cm}^{-1}$ , wobei die zweite Schwingung doppelt entartet ist während die anderen nicht entartet sind. Die Rotationskonstante  $B$  beträgt  $0,3902\text{ cm}^{-1}$ .

Berechnen Sie die Translations-, Rotations- und Schwingungsbeiträge zur Wärmekapazität sowie zur Entropie bei 298 K.

$m(^{16}\text{O}) = 15,9949\text{ u}$ ,  $1\text{ u} = 1,661 \cdot 10^{-27}\text{ kg}$

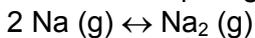
### Aufgabe 4.2 (Ortho- und Parawasserstoff)

Die unten gezeigte Graphik gibt die Besetzungszahlen von Wasserstoffmolekülen ( $^1\text{H}_2$ ) in Abhängigkeit der Rotationsquantenzahl  $J$  wider. Es fällt auf, daß die ungeraden Rotationsquantenzahlen deutlich stärker populiert sind als die mit geradem  $J$ . Geben Sie eine Erklärung für diesen Tatbestand. (Nachlesen!)



### Aufgabe 4.3 (Dissoziationsgleichgewicht)

Natrium Dampf liegt in der Gasphase teilweise in Form von Dimeren vor:



a) Berechnen Sie die Gleichgewichtskonstante  $K_p$  dieser Reaktion für 1000 K unter Verwendung der folgenden spektroskopischen Daten:

$$\text{Na}_2: \quad B = 0,1547\text{ cm}^{-1}$$

$$\tilde{\nu}_0 = 159,2\text{ cm}^{-1}$$

$$D_0 = 70,4\text{ kJ/mol}$$

Der Grundzustand der Natriumatome ist ein  $^2\text{S}_{1/2}$ - der der Natriummoleküle ein  $^1\Sigma$ -Term. Die elektronisch angeregten Zustände können in guter Näherung vernachlässigt werden.

$$m(\text{Na}) = 22,990\text{ u}; \quad 1\text{ u} = 1,661 \cdot 10^{-27}\text{ kg}$$

b) Bestimmen Sie ausgehend von diesem Ergebnis den Molenbruch  $\text{Na}_2$  in der Gasphase bei 1000 K und Normaldruck (1 bar).