

1. Számítsuk ki a következő atomok termikus hullámhosszát és translációs partíciós függvényét egy  $l = 2$  cm élhosszúságú dobozban:
- argon 100 K hőmérsékleten ( $M(\text{Ar})=39,95$  g/mol)
  - neon 25 K hőmérsékleten ( $M(\text{Ne})=20,18$  g/mol)
  - hélium 6 K hőmérsékleten ( $M(\text{He})=4,003$  g/mol).

(9 pont)

2. Vezessük le a tökéletes gázok fundamentális egyenletét (Sackur-Tetrode egyenlet) a kanonikus állapotösszegekből.

(15 pont)

3. Mennyivel járul hozzá a rotáció és/vagy a rezgés az  $\text{I}_2$  belső energiájához és entrópiájához 600 K hőmérsékleten? A rotációs állandó értéke  $0,03739$   $\text{cm}^{-1}$ , a rotáció szimmetria állandója  $\sigma=2$ , a rezgés hullámszáma  $214,5$   $\text{cm}^{-1}$ .  $M(\text{I}_2)=253,8$  g/mol.

(10 pont + 10 pont szorgalmi)

4. Mekkora két energiaszint különbsége, ha a hőmérséklet 200,0 K, a felső energiaszint betöltöttsége az alsóénak egyszázad része, és a felső energiaszint kétszeresen degenerált?

(6 pont)

$$N_A = 6,0221 \cdot 10^{23} \quad R = 8,3145 \frac{J}{mol \cdot K} \quad c = 2,9979 \cdot 10^8 \frac{m}{s} \quad k = \frac{R}{N_A} = 1,3807 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$$

$$\ln N! = N \ln N - N \quad m_{ae} = 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$F = U - TS \quad G = H - TS \quad H = U + PV \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$c_p = \left( \frac{\partial H}{\partial T} \right)_{P,N} \quad c_v = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} \quad \frac{d}{d\beta} = -kT^2 \frac{d}{dT}$$

$$Q = \sum_{\forall i} e^{-\beta E_i} = \prod_{j=1}^N q_j \quad F(T, V, N) = -kT \ln Q \quad S(E, V, N) = k \ln \Omega(E, V, N)$$

$$S = 3kN \ln \left( 1 + \frac{U}{3N\hbar\omega_0} \right) + \frac{kU}{\hbar\omega_0} \ln \left( 1 + \frac{3N\hbar\omega_0}{U} \right) \quad U = -\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} = -\frac{1}{Q} \frac{\partial Q}{\partial \beta}$$

$$\left( \frac{\partial S}{\partial U} \right)_{V,N} = \frac{1}{T} = \frac{k}{\varepsilon} \ln \left( \frac{N\varepsilon}{U} - 1 \right) \quad c_v = \frac{N_A \beta \varepsilon^2}{T (e^{\beta\varepsilon/2} + e^{-\beta\varepsilon/2})^2} \quad S = -\frac{F}{T} + \frac{U}{T}$$

$$Q = \frac{1}{N!} (q^T \cdot q^R \cdot q^V \cdot q^E)^N \quad q^T = \frac{V}{\Lambda^3} \quad (Q = \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}} \right)^{3N})$$

$$\Lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \quad q^R = \frac{1}{\sigma\beta\hbar cB} \quad q^V = \frac{1}{1 - e^{-\hbar c\nu\beta}} \quad U = \frac{3}{2} nRT$$

$$F(T, V, N) = -NkT \left[ 1 + \ln \left( \frac{V}{N} \left[ \frac{2\pi mkT}{h^2} \right]^{3/2} \right) \right] \quad C_v = n \frac{3}{2} R$$

$$S(T, V, N) = -\left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} = nR \left[ \frac{5}{2} + \ln \left( \frac{V}{N} \left[ \frac{2\pi mkT}{h^2} \right]^{3/2} \right) \right] \quad P = -\left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = NkT \frac{1}{V}$$

$$\sigma^2(E) = -\frac{\partial U}{\partial \beta} \quad \mu(T, V, N) = N_A \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = -RT \ln \left( \left[ \frac{2\pi mkT}{h^2} \right]^{3/2} \right)$$

$$K = \prod_{i=1}^r \left( \frac{q_{m,i}}{N_A} \right)^{V_i} \cdot e^{-\frac{\Delta_r U_0}{RT}} \quad c_v = \frac{1}{2} R (3 + \nu_R + 2\nu_V)$$