1. Fizikai kémia ZH, 2010. március 10.

1. Számítsuk ki a hélium atomok termikus hullámhosszát és transzlációs partíciós függvényét egy l = 1 cm élhosszúságú dobozban 4 K hőmérsékleten és 100 K hőmérsékleten! Mekkora a gáz standard moláris entrópiája ezeken a hőmérsékleteken? Ennek mekkora hányada ered rotációból?

(10 pont)

2. Számítsuk ki a H_2O-molekula vibrációs állapotösszegét 400 K hőmérsékleten, a három vibrációra vonatkozó állapotösszeg első 4-4 állapotára történő közvetlen összegzésével, valamint a jól ismert

$$q^V = \frac{1}{1 - e^{-hc\tilde{\nu}\beta}}$$

képlet segítségével. Hasonlítsuk össze és értelmezzük az eredményeket! A H_2O-molekula rezgési hullámszámai: 3656,7 cm^{-1}, 1594,8 cm^{-1} és 3755,8 cm^{-1}.

(20 pont)

3. Mekkora a CO_2-molekula forgómozgása első négy energiaszintjének relatív betöltöttsége 100 K és 300 K hőmérsékleten, ha a forgási állandó B=0,3092 cm^{-1}, és a lineáris rotor energiáját a következő képlet adja meg:

$$E_J = hcBJ(J+1)$$

A forgási állapotok degenerációja $2J$+1-szeres. A forgási kvantumszám értékei: J=0,1,2, …

(10 pont)

4. Az ekvipartíció tétele alapján, határozzuk meg a következő gázok állandó térfogathoz tartozó moláris hőkapacitását! Értelmezzük a kísérleti eredményeket!

	T/K	$C_{V,m}$ **(J/(mol·K))**
Ar	298	12,5
CO	298	20,2
Cl_2	298	24,1
CO_2	298	28,46
H_2O	373	28,03

(10 pont)

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\Lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \qquad q^R = \frac{1}{\sigma\beta hcB} \qquad q^V = \frac{1}{1 - e^{-hc\tilde{\nu}\beta}} \qquad q^{vibr} = \prod_{j=1}^{3N-6} q^{V_j}$$

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

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

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

$$K = \prod_{i=1}^{r}\left(\frac{q_{m,i}^{\ominus}}{N_A}\right)^{\nu_i} \cdot e^{-\frac{\Delta_r U_0}{RT}} \qquad c_V = \frac{1}{2}R\left(3 + \nu_R + 2\nu_V\right) \qquad \frac{p_1}{p_2} = \frac{g_1}{g_2} e^{-\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{kT}}$$