

1. Számítsuk ki a hélium termikus hullámhosszát és translációs partíciós függvényét egy $l = 2$ cm élhosszúságú dobozban 4 K hőmérsékleten ($M(\text{He})=4,003$ g/mol). Mekkora a gáz standard moláris szabadenergiája, entrópiája és belső energiája ezen a hőmérsékleten? Számítsuk ki, hogy egy izolált rendszerben hány mikroszkopikus állapot felelne meg ennek az entrópiának!

(12 pont)

2. Számítsuk ki egy harmonikus oszcillátor energiája várható értékét a vibrációs partíciós függvényből! Fejezzük ki a várható értéket a magas hőmérsékletű esetben is, azaz ha $hc\nu \ll kT$! Ekkor használjuk fel az exponenciális függvény sorfejtését: $e^{-x} = 1 - x + \frac{x^2}{2} - \dots$

(12 pont)

3. Egy kétállapotú molekula elektron partíciós függvényének értéke 300 K hőmérsékleten 2,30. Az alapállapot és a gerjesztett állapot is kétszeresen degenerált. Számítsa ki a gerjesztett állapot energiáját az alapállapot energiájához képest! Mekkora a szintek betöltöttségének aránya? Mennyi lesz a partíciós függvény értéke és a betöltöttség aránya 3000 K hőmérsékleten?

(8 pont)

4. Az ekvipartíció tétele alapján, határozzuk meg a következő gázok állandó térfogathoz és állandó nyomáshoz tartozó moláris hőkapacitását! Ha C_p és C_v kapcsolatát nem tudjuk feleleveníteni, emlékezzünk az entalpia definíciójára, valamint arra, hogy a gázokat ideálisnak tekintjük! 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 ₂ O	373	28,03

(15 pont)

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\Lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \quad q^R = \frac{1}{\sigma\beta\hbar cB} \quad q^V = \frac{1}{1 - e^{-\hbar c\nu\beta}} \quad q^{vibr} = \prod_{j=1}^{3N-6} q^{V_j}$$

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

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

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

$$K = \prod_{i=1}^r \left(\frac{q_{m,i}}{N_A} \right)^{v_i} \cdot e^{-\frac{\Delta_r U_0}{RT}} \quad c_v = \frac{1}{2} R (3 + v_R + 2v_V) \quad \frac{p_1}{p_2} = \frac{g_1}{g_2} e^{-\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{kT}}$$