

ProefTentamen

Zie voor hulp bij de beantwoording ook de constanten en formules onderaan blz 2.

- 1) De Boltzmann formule speelt een cruciale rol binnen de chemie. Hoe ziet deze formule er uit? Geef een duidelijke omschrijving met woorden en een figuur wat de formule betekent.
- 2) De moleculaire partitiefunctie, q , speelt een centrale rol in de bepaling van thermodynamische eigenschappen van bulk materiaal.
 - a) Wat is de eenheid van q , wat zijn de fysisch toegestane onder- en bovengrenzen van q ?
 - b) Geef een beschrijving van q in relatie tot de energietoestanden van een lineair molecuul (geen gedetailleerde formules nodig).
 - c) Wat gebeurt er met q wanneer de temperatuur naar 0 Kelvin gaat?
- 3) Hoeveel vibratiemodi heeft ethanol, C_2H_5OH ? Stel dat we in een constant volume V een ethanoldamp hebben bij een temperatuur T ver boven de vibratietemperatuur θ_{vib} van de vibratiemodus met de hoogste harmonische frequentie.
 - a) Wat is de vibratietemperatuur θ_{vib} in algemene zin, wat wordt ermee beschreven?
 - b) Wat is de molaire warmtecapaciteit (bij constant volume), C^m_V , van ethanol?
- 4) OCS is een lineair molecuul met een rotatieconstante $B = 0.203 \text{ cm}^{-1}$. In een experiment meten we een rotationeel absorptiespectrum van OCS.
 - a) Wat is de frequentie (in Hz) van de straling die je moet hebben om een absorptie te induceren tussen het rotatieniveau $J=3$ en $J=4$.
 - b) We meten de intensiteiten van twee absorptielijnen:
lijn1 is de absorptie vanuit niveau $J=3$ en heeft een intensiteit 1.0 (relatieve eenheden), lijn2 is de absorptie vanuit niveau $J=5$ en heeft een intensiteit 0.2.
Wat is de rotatietemperatuur van OCS?
- 5) Stel we hebben een polyatomair molecuul met 2 vibratiemodi met relatief lage frequenties, $\nu_1=150 \text{ cm}^{-1}$ en $\nu_2=190 \text{ cm}^{-1}$, en een derde mode $\nu_3=3100 \text{ cm}^{-1}$. De ontgaarding van ν_1 en ν_3 is tweevoudig, mode ν_2 is niet ontgaard.
Wat is de vibrationele partitiefunctie bij $T=375 \text{ Kelvin}$?
- 6) Stel we hebben een twee-niveau systeem met een energieverschil, ϵ , tussen de twee niveaus $\epsilon = 450 \text{ cm}^{-1}$. Het onderste niveau is niet ontgaard, het bovenste niveau is drievoudig ontgaard. Wat is de gemiddelde energie van 1 mol bij $T = 450 \text{ Kelvin}$.
- 7)
 - a) Hoe groot is de kinetische energie van een atoom van een ideaal gas bij een temperatuur T ?
 - b) Laat zien dat de molaire entropie van een ideaal atomair gas gegeven wordt door

$S = R \ln(e^{5/2} kT / (p \Lambda^3))$. Zie ook de formules hieronder.

c) Hoe groot is de entropie S voor 1 mol Krypton bij $T=150$ Celcius; $m(\text{Kr}) = 84$ atomaire massa-eenheden.

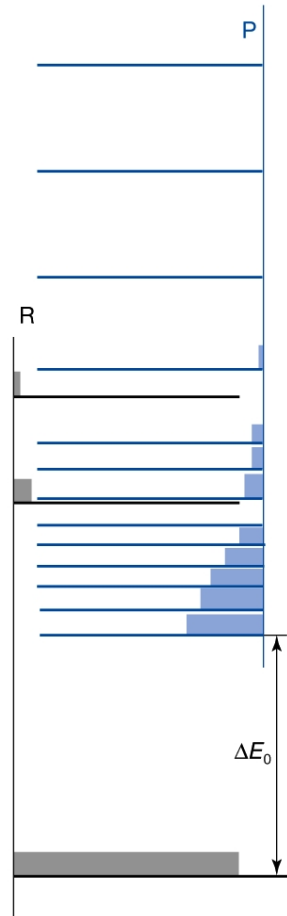
8) In nevenstaande figuur is schematisch weergegeven hoe de energieniveaus van reactanten, R, liggen t.o.v. de niveaus van de producten, P.

Is deze reactie endothermisch of exothermisch?

De evenwichtsconstante K wordt gegeven door:

$$K = (q^P/q^R) e^{(-\Delta E_0/RT)}$$

Stel dat de partitiefunctie van R, q^R , 5 maal zo klein is als de partitiefunctie van P, q^P . Bij welke temperatuur T geldt dat $K = 0.35$, wanneer gegeven is dat $\Delta E_0 = 31$ kJ/mol.



Constantes en formules:

$$c = 2.99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$\text{elementaire lading } e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$k = 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

$$R = 8.31447 \text{ J/(K mol)}$$

$$h = 6.62608 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\text{atomaire massa eenheid } u = 1.66054 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$1 \text{ cm}^{-1} = 1.9864 \cdot 10^{-23} \text{ J}$$

$$\text{getal van Avogadro: } N_A = 6.02214 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

De entropie van een systeem van N ononderscheidbare deeltjes met moleculaire partitiefunctie q :

$$S = (U - U(0))/T + k \ln (q^N/N!)$$

Voor grote N : $\ln N! = N \ln N - N$

De translationele partitiefunctie voor een één-dimensionaal systeem met lengte L :

$$q = L/\Lambda, \text{ met } \Lambda = h (\beta/2\pi m)^{1/2}, \beta = 1/kT.$$