

Tentamen Fysische Chemie 2, 28 Mei 2008, 8.45-11.30

Zie voor hulp bij de beantwoording ook de constantes 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 propaan C_3H_8 ? Stel dat we in een constant volume V propaan 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 propaan?
- 4) N_2O is een lineair molecuul met een rotatieconstante $B = 0.41 \text{ cm}^{-1}$. In een experiment meten we een rotationeel absorptiespectrum van N_2O .
 - a) Wat is de frequentie (in Hz) van de straling die je moet hebben om een absorptie te induceren tussen het rotatieniveau $J=4$ en $J=5$.
 - b) We meten de intensiteiten van twee absorptielijnen:
lijn1 is de absorptie vanuit niveau $J=4$ en heeft een intensiteit 1.0 (relatieve eenheden), lijn2 is de absorptie vanuit niveau $J=5$ en heeft een intensiteit 0.6.
Wat is de rotatietemperatuur van N_2O ?
 - c) Weet je een manier om N_2O te maken met deze rotatietemperatuur?
- 5) Stel we hebben een polyatomair molecuul met 2 vibratiemodi met relatief lage frequenties, $\nu_1=120 \text{ cm}^{-1}$ en $\nu_2=180 \text{ cm}^{-1}$, en een derde mode $\nu_3=2900 \text{ cm}^{-1}$. De ontgaarding van ν_1 en ν_3 is tweevoudig, mode ν_2 is niet ontgaard.
Wat is de vibrationele partitiefunctie bij $T=375$ Kelvin?
- 6) Stel we hebben een twee-niveau systeem met een energieverschil, ϵ , tussen de twee niveaus $\epsilon = 375 \text{ cm}^{-1}$. Het onderste niveau is niet ontgaard, het bovenste niveau is tweevoudig ontgaard.
Wat is de gemiddelde energie van 1 mol bij $T = 520$ Kelvin.
- 7)
 - a) Hoe groot is de kinetische energie van een atoom van een ideaal gas bij een temperatuur T ?