

Άσκηση 3.1

Να κατατάξετε κατά φθίνουσα τάξη μεγέθους τις χαρακτηριστικές θερμοκρασίες περιστροφής θ_R των μορίων Cl_2 , H_2 , και HCl , δικαιολογώντας πλήρως του ισχυρισμούς σας. Όσα τυχόν δεδομένα δεν σας δίνονται, μπορείτε να τα αναζητήσετε στη βιβλιογραφία.

Άσκηση 3.2

Ο κυματάρημος δόνησης του μορίου υδροχλωρίου (HCl) στην αέρια φάση είναι 2991 cm^{-1} και το μήκος δεσμού H-Cl ίσο με $l = 1.27 \text{ \AA}$.

α) Να υπολογίσετε:

- τις χαρακτηριστικές θερμοκρασίες περιστροφής θ_R και δόνησης θ_v του HCl .
- τις τιμές των αντίστοιχων συνιστωσών q_{rot} και q_{vib} στο κανονικό άθροισμα μικρο-καταστάσεων του HCl .

β) Να υπολογίσετε την γραμμομοριακή εντροπία του HCl(g) στους 298K , σε κατάσταση ιδανικού αερίου (γνωστή και ως standard molar entropy).

Άσκηση 3.3

Το μόριο του CO_2 είναι γραμμικό (O=C=O), με το μήκος κάθε δεσμού άνθρακα-οξυγόνου ίσο με 1.305 \AA . Επίσης δίνονται οι κυματάρημοι των τεσσάρων κανονικών τρόπων δόνησης του μορίου:

1388.2 cm^{-1} , 667.2 cm^{-1} (διπλά εκφυλισμένος), 2349.2 cm^{-1}

(α) Να υπολογισθούν η περιστροφική συνεισφορά q_{rot} και η δονητική συνεισφορά q_{vib} στο μοριακό κανονικό άθροισμα μικρο-καταστάσεων του μορίου CO_2 στους 1000 K . Να δικαιολογήσετε πλήρως την πορεία των υπολογισμών σας.

(β) Να εκτιμήσετε (πολύ προσεγγιστικά) την γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο $C_{V,m}$ του CO_2 σε κατάσταση ιδανικού αερίου στους 1000 K .

(γ) Να υπολογίσετε λεπτομερώς την γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή όγκο $C_{V,m}$ του CO_2 σε κατάσταση ιδανικού αερίου στους 1000 K και να τη συγκρίνετε με την προσεγγιστική απάντησή σας στο ερώτημα (β).