RNDr. Jan Prokleška Ph.D.
prokles@mag.mff.cuni.cz
(22191) 1653, 2772, 2736
`kfes.troja.mff.cuni.cz/fyzikaIV`

cvičení FIV 7.4.2022

7.1 • *Určete měrnou tepelnou kapacitu jednoatomového plynu (např. He, Ne; na jeden mol při konstantním objemu). Proč nezávisí na teplotě?*

Molekula má tři translační stupně volnosti, na každý připadá podle ekvipartičního teorém $\frac{R}{2}$ (uvažujeme-li molární tepelnou kapacitu).

• *Určete totéž (v limitě vysokých teplot) pro dvouatomové molekuly (např. O_2, N_2). Jaký bude výsledek pro nízké teploty?*

Totéž + ve vyšších teplotách aktivované rotační ($\frac{R}{2}$ na jeden) a vibrační (R) stupně volnosti, dohromady $\frac{7R}{2}$. V nízkých teplotách poslední dva stupně volnosti zamrzají, což vede na stejný výsledek jako výše.

• *Teplota přechodu T_t je teplota při které je potřeba začít uvažovat i rotační stupně volnosti. Odhadněte poměr těchto teplot přechodů pro molekulu vodíku H_2 a deuteria D_2.*

Vyjdeme z úvahy, že rotační enerie je úměrná teplotě a dále je úměrná momentu setrvačnosti, který je úměrný hmotnosti (vzdálenost jader je v prvním přiblížení stejná, neb je určena elektrostatickými silami), tj.

$$\frac{T_{\mathrm{D}_2}}{T_{\mathrm{H}_2}} \sim \frac{J_{\mathrm{H}_2}}{J_{\mathrm{D}_2}} \sim \frac{m_{\mathrm{H}_2}}{m_{\mathrm{D}_2}} = \frac{1}{2}$$

• *Uvažte dva stejné objemy plynů vodíku a deuteria na stejné (nízké) teplotě. Odhadněte poměr rychlostí zvuku těchto dvou případů.*

Rychlost zvuku v ideálním plynu je[1]

$$v = \sqrt{\frac{\kappa k T}{m}}\ ,$$

kde κ je Poissonova konstanta (stejná pro všechny dvouatomové molekuly), dostáváme tedy

$$\frac{v_{\mathrm{H}_2}}{v_{\mathrm{D}_2}} = \sqrt{2}$$

7.2 *Na přednášce zaznělo, že rotační stupně volnosti jsou aktivovány při teplotě $\frac{\hbar^2}{2I} \approx k_\mathrm{B}T$, přičemž experimentálně určená charakteristická teplota pro molekulu vodíku je $\sim 80K$. Odhadněte vzdálenost atomů ve vodíkové molekule, srovnejte se skutečností.*

Rotační stupně volnosti jsou aktivovány při $\frac{\hbar^2}{2J} \approx k_\mathrm{B}T$, kde $I = 2m\left(\frac{D}{2}\right)^2$ je moment setrvačnosti molekuly. Úpravami získáme

$$D = \hbar\sqrt{\frac{1}{mkT}} \approx 0.78\text{Å}$$

[1] např. `https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/e/eb/Introduction_to_Physical_Chemistry_Lecture_5_Supplement.pdf`

což je v dobré shodě s realitou (0.74Å).

7.3 *Ukažte, že se vibrační příspěvek k měrnému teplu*

$$C_V = N_{\mathrm{A}} k_{\mathrm{B}} \left(\hbar\omega_0\beta\right)^2 \frac{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_0}}{\left(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_0} - 1\right)^2}$$

pro $T \to \infty$ *blíží k* R.

Přímočarý postup (β jdoucí nule, jednička v čitateli a rozvoj kolem nuly ve jmenovateli) vede na očekávaný výsledek $N_{\mathrm{A}} k_{\mathrm{B}} = R$.