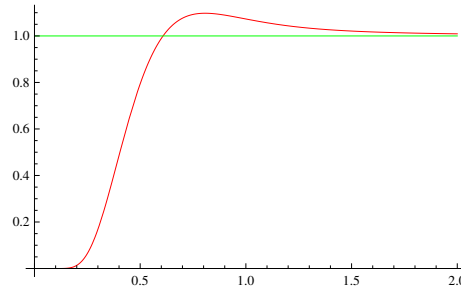


Ideális gázmolekulák fajhője

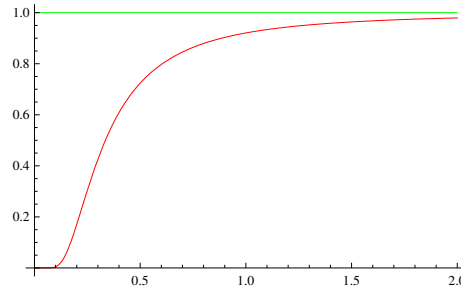
Kiegészítés III. éves BSc fizikusok számára

Cserti József
 Eötvös Loránd Tudományegyetem,
 Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

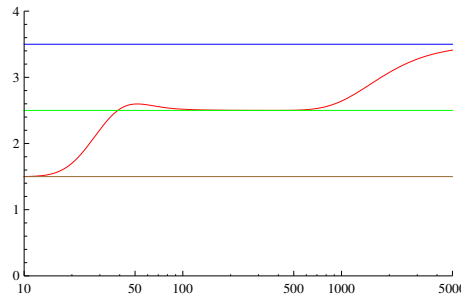
2010. március 16.



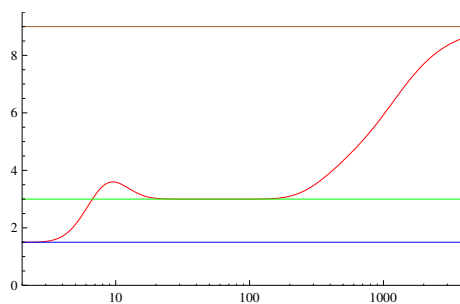
1. ábra. A rotációs fajhő (R/M egységben) a hőmérséklet (T/T_{rot} egységben) függvényében. $T_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2k_{\text{B}}\Theta}$. A fajhő maximumának helye $T_{\text{max}} = 0,81T_{\text{rot}}$ és értéke $1.1R/M$.



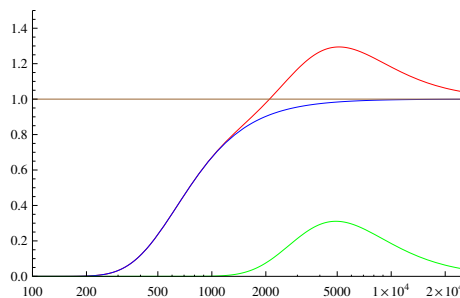
2. ábra. A vibrációs fajhő (R/M egységben) a hőmérséklet (T/T_{vibr} egységben) függvényében. $T_{\text{vibr}} = \frac{\hbar\omega}{k_{\text{B}}}$.



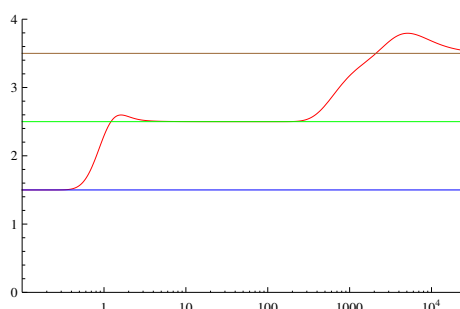
3. ábra. A HD kétatomos molekula fajhője (R/M egységben) a hőmérséklet (K egységben) függvényében. $T_{\text{rot}} = 64$ K, $T_{\text{vibr}} = 5300$ K. A fajhő 20 K és 70 K között látható a R. Kubo: Statisztikus mechanika példákval és feladatokkal, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976, könyv 226. oldal tetején lévő ábrán. Adatok: F. Schwabl: Statistical Mechanics, Springer-Verlag, Berlin, 2002.



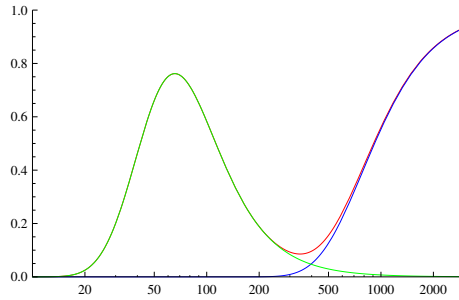
4. ábra. Az NH_3 molekula translációs, rotációs és vibrációs fajhője (piros) a hőmérséklet függvényében. A fajhő R/M egységben, míg a hőmérséklet K egységben van. A molekula szimmetrikus pörgettyűnek tekinthető, azaz a főtételenségi nyomatékai: $\Theta_x = \Theta_y = 2,816 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2$, $\Theta_z = 4,44 \cdot 10^{-47} \text{ kg m}^2$. A szimmetrikus pörgettyű kvantumos tárgyalása megtalálható a Landau–Lifsic: Elméleti Fizika III. Kvantummechanika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1978, könyv 484. oldalán. Az állapotösszeg klasszikus számítása megtalálható a R. Kubo: Statisztikus mechanika példákkal és feladatokkal, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976, könyv 225. oldal, 4. feladat megoldásában. A vibrációs spektrum (összesen 6 rezgési módus van): $T_{\text{vibr},1} = T_{\text{vibr},2} = (\hbar c/k_B) 3336 \text{ cm}^{-1} = 4799,8 \text{ K} = 0,413 \text{ eV}$, $T_{\text{vibr},3} = T_{\text{vibr},4} = (\hbar c/k_B) 950 \text{ cm}^{-1} = 1366 \text{ K} = 0,118 \text{ eV}$, $T_{\text{vibr},5} = (\hbar c/k_B) 3414 \text{ cm}^{-1} = 4912 \text{ K} = 0,423 \text{ eV}$ és $T_{\text{vibr},6} = (\hbar c/k_B) 1627 \text{ cm}^{-1} = 2341 \text{ K} = 0,202 \text{ eV}$. Adatok: R. Kubo: Statisztikus mechanika példákkal és feladatokkal, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976, könyv 226. oldal, 8. feladat.



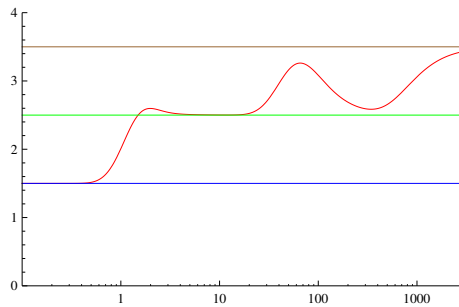
5. ábra. Az O_2 molekula elektron és vibrációs fajhője együtt (piros), a fajhő vibrációs járuléka külön (kék), illetve az elektron járuléka külön (zöld) a hőmérséklet függvényében. A fajhő R/M egységben, míg a hőmérséklet K egységben van. $T_{\text{rot}} = 2 \text{ K}$, $T_{\text{vibr}} = 2229 \text{ K}$, $T_{\text{el}} = 11257 \text{ K}$. Az O_2 molekula alapállapotú és első gerjesztett elektronszintjének energiakülönbsége $\varepsilon = (\hbar c/k_B) 7824 \text{ cm}^{-1} = 11257 \text{ K} = 0,97 \text{ eV}$, illetve degenerációi $g_0 = 3$ és $g_1 = 2$. Adatok: R. Kubo: Statisztikus mechanika példákkal és feladatokkal, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976, 226. oldal, 9. feladat, illetve F. Schwabl: Statistical Mechanics, Springer-Verlag, Berlin, 2002.



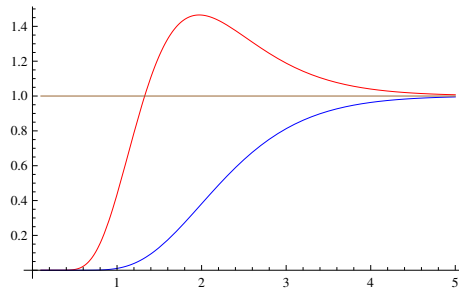
6. ábra. Az O_2 molekula translációs, rotációs, vibrációs és elektron fajhője együtt (piros) a hőmérséklet függvényében. A fajhő R/M egységben, míg a hőmérséklet K egységben van. $T_{\text{rot}} = 2 \text{ K}$, $T_{\text{vibr}} = 2229 \text{ K}$, $T_{\text{el}} = 11257 \text{ K}$. Az O_2 molekula alapállapotú és első gerjesztett elektronszintjének energiakülönbsége $\varepsilon = (\hbar c/k_B) 7824 \text{ cm}^{-1} = 11257 \text{ K} = 0,97 \text{ eV}$, illetve degenerációi $g_0 = 3$ és $g_1 = 2$. Adatok: R. Kubo: Statisztikus mechanika példákkal és feladatokkal, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976, 226. oldal, 9. feladat, illetve F. Schwabl: Statistical Mechanics, Springer-Verlag, Berlin, 2002.



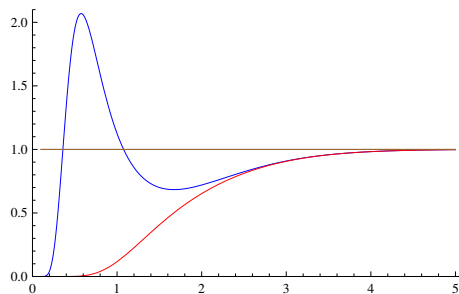
7. ábra. Az NO molekula elektron és vibrációs fajhője együtt (piros), a fajhő vibrációs járuléka külön (kék), illetve az elektron járuléka külön (zöld) a hőmérséklet függvényében. A fajhő R/M egységben, míg a hőmérséklet K egységben van. $T_{\text{rot}} = 2,46$ K, $T_{\text{vibr}} = 2741$ K, $T_{\text{el}} = 174,24$ K. Az NO molekula alapállapotú és első gerjesztett elektronszintjének energiakülönbsége $\varepsilon = (\hbar c/k_B) 121,1 \text{ cm}^{-1} = 174,24 \text{ K} = 15,0 \text{ meV}$, illetve degenerációi $g_0 = 2$ és $g_1 = 4$. Adatok: T. M. Reed és K. E. Gubbins: Gázok és folyadékok statisztikus termodinamikája, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978, 87. oldal, 3.4 táblázat.



8. ábra. Az NO molekula translációs, rotációs, vibrációs és elektron fajhője együtt (piros) a hőmérséklet függvényében. A fajhő R/M egységben, míg a hőmérséklet K egységben van. $T_{\text{rot}} = 2,46$ K, $T_{\text{vibr}} = 2741$ K, $T_{\text{el}} = 174,24$ K. Az NO molekula alapállapotú és első gerjesztett elektronszintjének energiakülönbsége $\varepsilon = (\hbar c/k_B) 121,1 \text{ cm}^{-1} = 174,24 \text{ K} = 15,0 \text{ meV}$, illetve degenerációi $g_0 = 2$ és $g_1 = 4$. Adatok: T. M. Reed és K. E. Gubbins: Gázok és folyadékok statisztikus termodinamikája, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978, 87. oldal, 3.4 táblázat.



9. ábra. A H_2 molekula fajhője (R/M egységben) parahidrogénre ($j = \text{páros}$, piros) és orthohidrogénre ($j = \text{páratlan}$, kék) a hőmérséklet (T/T_{rot} egységben) függvényében.



10. ábra. A H_2 molekula parahidrogén és orthohidrogén együttesének egyensúlyi (kék) és metasztatikus állapotának (piros) fajhője (R/M egységben) a hőmérséklet (T/T_{rot} egységben) függvényében.