

Übungsblatt Nr. 6

Physikalische Chemie I - Teil I

Wintersemester 2012/13

Aufgabe 1

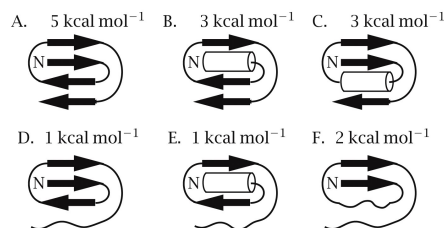
Geben Sie die Anzahl der Rotations- und Schwingungsfreiheitsgrade für die folgenden Moleküle an: HCl, CO_2, H_2O, CH_4

Aufgabe 2

- a Wie lautet die Boltzmann-Verteilung und was beschreibt sie?
- b Betrachten Sie ein lineares zweiatomiges Molekül mit einer Infrarotabsorption bei $2 * 10^{13} Hz$, d.h. einer Energiedifferenz $\Delta E = 1.3 * 10^{-20} J$ zwischen Grundzustand ($E=0$) und erstem angeregten Zustand. Welcher Anteil der Moleküle ist bei Raumtemperatur ($T=298K$) im Grundzustand bzw im ersten angeregten Schwingungszustand? Geben Sie unter Berücksichtigung Ihres Ergebnisses die molare Wärmekapazität $c_{V,m}$ der oben genannten Moleküle bei Raumtemperatur an.

Aufgabe 3

Nehmen Sie an, dass ein Protein die folgenden sechs verschiedenen Konformationen annehmen kann. Jede Konformation hat eine bestimmte Energie.



- a Geben Sie einen Ausdruck an für:
- die Wahrscheinlichkeit $p(i)$, dass das Protein die Konformation i annimmt?
 - die Wahrscheinlichkeit $p(E)$, dass das Protein im Zustand mit der Energie E vorliegt?
- b Benutzen Sie die in a) aufgestellten Gleichungen, um die folgenden Wahrscheinlichkeiten zu berechnen:
- $p(\text{Zustand B})$
 - $p(\text{Zustand A})$
 - $p(\text{Zustand D})$
 - $p(1 \text{ kcal/mol})$
 - $p(-5 \text{ kcal/mol})$
- c Wie groß ist die Energie mit der dieses Protein im Durchschnitt vorliegt?

Aufgabe 4

Stellen Sie mit Hilfe einer Taylorreihenentwicklung einen Zusammenhang zwischen den Variablen a und b der van-der-Waals-Gleichung für reale Gase und dem Virialkoeffizienten B her. Bestimmen Sie daraus anschließend allgemein die Boyle-Temperatur ($B(T_B) \approx 0$).