

UE 36CHMF6 — Thermodynamique Statistique

Durée conseillée : 1h. Aucun document autorisé. Les calculatrices ne sont autorisées qu'à des fins de calcul. Toute réponse doit être justifiée.

Barème approximatif : I (7 points), II (13 points).

I ■ Questions de cours :

a) Démontrer le principe d'équipartition de l'énergie pour le calcul de l'énergie interne de translation et de rotation. Quel est le rôle de l'indiscernabilité des molécules ?

b) Définir le nombre de symétrie σ . En déduire la valeur de σ pour les molécules suivantes : CO_2 , H_2O , éthane, 1,1,1-trichloroéthane, *para*-phénylphénol.

c) Combien de modes de vibration les molécules précédentes possèdent-elles ?

II ■ Calculer l'entropie molaire du benzène $\text{C}_6\text{H}_6(\text{g})$ à 298,15 K sous une pression de 1 atm. On négligera la contribution de la vibration.

On rappelle que plus un axe principal de rotation contient d'éléments de symétrie, plus le moment d'inertie associé est faible.

Données:

masses molaires (g mol^{-1}) :

$$M_{\text{C}} = 12,011 \text{ et } M_{\text{H}} = 1,008$$

constantes rotationnelles (MHz) :

$$B' = 5450,0 \text{ et } B'' = 5689,2$$