

to g.m-3 = -1.5

Červený trpaslík má teplotu

$T=(23+\text{rnd}(5))*100[\text{K}] = 2500 [\text{K}]$ v místě, kde je hustota vodíku

$\rho=10**(-\text{rnd}(3))*1[\text{g.m-3}] = 1 [\text{g.m-3}]$. Vypočtete, kolik hmotnostních % vodíku bude v molekulární formě H_2 .

Experimentální disociační energie vodíku je 4.478 eV, fundamentální vlnčet pro přechod $v = 0 \rightarrow 1$ je 4161 cm^{-1} , délka vazby 0.7414 \AA .

Předpokládejte, že systém je v rovnováze. Plyny jsou ideální. Zanedbejte vzbuzené stavy H^* , přítomnost H^+ , H^- , H_2^+ , e^- , statistiku spinů jader při rotaci molekuly a anharmonicitu vibrací.

$$\text{LambdaH}=\text{h}/\text{sqrt}(2*\text{pi}*m(\text{H})*k*T) = 3.478\text{e-}11 [\text{m}]$$

$$\text{LambdaH2}=\text{h}/\text{sqrt}(2*\text{pi}*m(\text{H2})*k*T) = 2.459\text{e-}11 [\text{m}]$$

$$\text{Edis}=4.478[\text{eV}] = 7.175\text{e-}19 [\text{J}]$$

$$\text{qtrH}=k*T/\text{pst}/\text{LambdaH}**3 = 8.098\text{e+}06$$

! 2 projekce spinu elektronu

$$\text{qH}=2*\text{qtrH} = 1.62\text{e+}07$$

! H_2 :

$$\text{d}=0.7414[\text{AA}] = 7.414\text{e-}11 [\text{m}]$$

$$\text{I}=m(\text{H})*\text{d}**2/2 = 4.6\text{e-}48 [\text{m}2 \text{ kg}]$$

! číslo symetrie $\sigma = 2$

$$\text{qrot}=\text{I}*k*T/\text{hbar}**2 = 14.28$$

$$\text{Evib}=4161[\text{cm-1}]*c*h = 8.266\text{e-}20 [\text{J}]$$

$$\text{qvib}=1/(1-\text{exp}(-\text{Evib}/k/T)) = 1.1$$

$$\text{qtr}=k*T/\text{pst}/\text{LambdaH2}**3 = 2.29\text{e+}07$$

$$\text{q}=\text{qvib}*\text{qrot}*\text{qtr} = 3.598\text{e+}08$$

! rovnovážná konstanta

$$\text{K}=\text{exp}(-\text{Edis}/k/T)*\text{qH}**2/\text{q} = 0.0006847$$

! rovnice pro rovnováhu

$$\text{def aH}=(1-w)*\rho*k*T/m(\text{H})/\text{pst} = (\text{defined})$$

$$\text{def aH2}=w*\rho*k*T/m(\text{H2})/\text{pst} = (\text{defined})$$

$$\text{solve } w=0.001,0.999 \text{ aH}**2/\text{aH2}-\text{K} = 0.9598$$

