QUIMICA FISICA AVANZADA TUTORIA Nº 2

1. ¿Cuál es la respuesta correcta?

1.1 Se tiene un sistema formado por 10^{20} partículas distinguibles no interactuantes donde cada partícula puede estar en un nivel de energía n con una energía $E(n)=Cn^2$, donde C es una constante con unidades de energía, una degeneración $g=(n^2+2)$ y donde n puede ser cualquier número entero entre cero e infinito. Cuanto vale la función de partición molecular a una temperatura de 0 K.

a) 0 b) 1 c) 2 d) $1/(10^{20})!$

1.2 Teniendo en cuenta:

Que para el cálculo de la función de partición vibracional hacemos uso del modelo de oscilador armónico y resolvemos el sumatorio haciendo uso de una serie matemática.

Que para el cálculo de la función de partición rotacional hacemos uso del modelo de rotor rígido y resolvemos el sumatorio con el uso de una integral.

Marque claramente que afirmación es correcta:

a) q_v y q_r son más exactas a medida que aumenta la temperatura

b) q_v es más exacta a medida que aumenta T y q_r es más exacta a medida que disminuye T.

c) q_r es más exacta a medida que aumenta T y q_v es más exacta a medida que disminuye T.

d) q_v y q_r son más exactas a medida que disminuye la temperatura

2.- Los átomos de sodio ($M=22.99\ gmol^{-1}$), tienen términos electrónicos fundamentales doblete.

a) Calcular la función de partición molecular molar estándar para los átomos de sodio a T=1000K. ¿Cuánto valdría la función de partición molecular a T=0 K?.

b) La molécula de Na_2 tiene una energía de disociación $D_0=70.4\ kJmol^{-1}$ una constante rotacional de $0.1547\ cm^{-1}$ y una vibración con $\bar{\nu}=159.2 cm^{-1}$. Calcula la constante de equilibrio a T=1000K para la reacción $Na_2(g) \Leftrightarrow 2Na(g)$.

<u>Tras leer detenidamente el apéndice del tema 2, contesta las siguientes preguntas:</u>

3. La distribución gaussiana se utiliza muy frecuentemente en distintos ámbitos para caracterizar funciones de distribución. Su forma genérica es:

$$f(x)=\frac{1}{\left(2\pi\sigma^2\right)^{1/2}}e^{-\frac{(x-\delta)^2}{2\sigma^2}}$$

a) Representa esta función tomando σ=0.6 y dando a δ los valores 0,1,2. ¿Qué observas?

b) Represéntala ahora tomando δ=0 y dando a σ los valores 0.6, 1.0, 1.5. ¿Cómo cambia la función?

4. Al estudiar los ingresos mensuales de los habitantes un determinado país se empleó la siguiente función de distribución:

$$f(x) = Cx^2 e^{-ax^2}$$

donde x son los ingresos mensuales en euros y a se determinó que valía $3.785 \cdot 10^{-6}$ $euros^{-2}$.

a) Calcule C sabiendo que la función de distribución debe estar normalizada.
b) ¿Cuáles son los ingresos mensuales medios de un habitante de ese país?
c) Representa la función de distribución. Indique gráficamente como determinaría la proporción de habitantes del país que tienen ingresos mensuales menores que el valor medio? ¿y mayores?. Calcula dichas proporciones haciendo uso de las tablas de integrales.
d) La varianza (σ^2) proporciona una medida de la 'anchura' de la distribución. Se puede demostrar que la varianza se puede calcular mediante la relación

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

¿Cuál es la varianza de la distribución de ingresos mensuales que estamos estudiando?

Respuestas

1:
2: a) 1.09E32 a1000 K y 2 a 0K. c) 2.45
4: a) C=1.6618E-8 euros^{-3}*; b) 580 euros; c) 53.3% y 46.7%; d) 60766 euros*^{2}.