

1. Indique, justificando brevemente su respuesta, si las siguientes afirmaciones son verdaderas o falsas.

- a) La energía de los diferentes microestados de un sistema macroscópico dependen de la temperatura del sistema.
- b) Para una molécula con sólo dos niveles electrónicos posibles (el fundamental no degenerado y el excitado triplemente degenerado) se obtiene un valor de la función de partición electrónica de 1 para  $T=0$  y de 2 para  $T=\infty$ .

2. La fracción de moléculas que tienen sus componentes de la velocidad entre los valores +250 m/s y +650 m/s viene dada por:

$$(a) \int_{250}^{650} \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} e^{-\frac{Mv_x^2}{2RT}} dv_x + \int_{250}^{650} \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} e^{-\frac{Mv_y^2}{2RT}} dv_y + \int_{250}^{650} \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} e^{-\frac{Mv_z^2}{2RT}} dv_z$$

$$(b) \int_{250}^{650} \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} e^{-\frac{Mv_x^2}{2RT}} dv_x \int_{250}^{650} \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} e^{-\frac{Mv_y^2}{2RT}} dv_y \int_{250}^{650} \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} e^{-\frac{Mv_z^2}{2RT}} dv_z$$

$$(c) 4\pi \int_{250}^{650} \left(\frac{M}{2\pi RT}\right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-\frac{Mv^2}{2RT}} dv$$

3. La velocidad molecular en una determinada dirección ( $v_x$  por ejemplo) de una muestra de gas formada por moléculas de masa  $m$  y a la temperatura  $T$  se distribuyen de acuerdo a la función:

$$g(v_x) = Ce^{-\frac{mv_x^2}{2kT}}$$

- a) Determina la constante  $C$  mediante la condición de normalización.
- b) Determina el valor medio de la componente  $x$  de la velocidad.
- c) Determina la varianza de la distribución.
- d) En una muestra de un mol de moléculas de argón a 300 K determina cuántas tendrían una velocidad  $v_x$  comprendida entre 0 y +300 m/s.

4.a) El potencial de interacción atractivo entre dos moléculas de agua en fase gaseosa a 400 K puede representarse mediante una función de la distancia. Determine esta función sabiendo que la molécula de agua tiene un momento dipolar de 1.85 D, una polarizabilidad de volumen de  $1.45 \text{ \AA}^3$  y una energía de ionización de 12.6 eV.

b) Sabiendo que la parte repulsiva del potencial viene dada por una función  $Br^{-12}$ , determine la posición del mínimo de energía entre dos moléculas de aguas ( $r_0$ ) si la energía de interacción a esa distancia es de -1.485 Kcal/mol

c) Calcula la contribución del potencial atractivo a la energía interna molar del vapor de agua si la densidad de éste es de  $50 \text{ mol/m}^3$ . Suponer que la función de distribución radial puede aproximarse como:

$$g(r)=0 \quad r < r_0$$

$$g(r)=1 \quad r \geq r_0$$

siendo  $r_0$  la posición del mínimo de energía entre dos moléculas de agua.

*Soluciones:*

3. a)  $C = \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2}$ ; b) 0; c)  $kT/m$ ; d) 38.5% ( $2.32E+23$  moléculas)

4. a)  $V(J) = -1.83 \cdot 10^{-77}/r(m)$ ; b) 3.1 Å; c)  $-23.35 J \cdot mol^{-1}$