

**1.1.** Al aumentar la temperatura el valor del promedio de la componente x de la velocidad de las moléculas de un gas:

- a) aumenta.
- b) disminuye.
- c) no cambia.
- d) depende si es a V o a P constante

Para un gas en reposo y con todas las direcciones equivalentes el valor promedio de cualquier componente de la velocidad es siempre cero.

Respuesta: **c**

**1.2.** Si  $\varepsilon$  es la energía promedio traslacional de una molécula a una temperatura  $T$ , entonces:

a)  $\varepsilon(\text{N}_2) > \varepsilon(\text{O}_2) > \varepsilon(\text{CO}_2)$

b)  $\varepsilon(\text{CO}_2) > \varepsilon(\text{O}_2) > \varepsilon(\text{N}_2)$

c)  $\varepsilon(\text{N}_2) = \varepsilon(\text{O}_2) < \varepsilon(\text{CO}_2)$

d)  $\varepsilon(\text{N}_2) = \varepsilon(\text{O}_2) = \varepsilon(\text{CO}_2)$

La energía traslacional promedio de una molécula es  $3/2(k \cdot T)$ . Por lo tanto a igual temperatura es igual para todo gas

Respuesta: **d**

**1.3** En un depósito situado en una cámara de vacío hay una mezcla equimolecular de  $N_2$  y  $O_2$  a una presión total de 1 atm. Se abre un pequeñísimo orificio de tal forma que el gas empieza a escapar. Al cabo de un tiempo:

- a) la fracción molar del  $N_2$  habrá disminuido y la del  $O_2$  aumentado.
- b) la fracción molar del  $O_2$  habrá disminuido y la del  $N_2$  aumentado.
- c) la fracción molar del  $O_2$  habrá disminuido y la del  $N_2$  disminuido.
- d) la fracción molar del  $O_2$  y del  $N_2$  no habrán variado.

La variación en el número de moléculas en un recipiente por efusión es:

$$\frac{dN}{dt} = -A_{or} Z_P = -\frac{A_{or} P}{(2\pi mkT)^{1/2}}$$

Como la masa de las moléculas de nitrógeno es menor que las de oxígeno, el primero escapa más rápidamente

Respuesta: **a**

**1.4.** Se sabe que en la atmósfera marciana: la frecuencia de colisión de una determinada molécula de  $N_2$  con otras moléculas de  $N_2$  es de  $1.54 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ ; la frecuencia de colisión de una determinada molécula de  $N_2$  con moléculas de  $CO_2$  es de  $5.65 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$ ; el número de colisiones por segundo y  $\text{cm}^3$  entre moléculas de  $N_2$  es de  $4.78 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ ; el número de colisiones por segundo y  $\text{cm}^3$  entre moléculas de  $N_2$  y de  $CO_2$  es de  $3.51 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ ;  
¿Cuánto vale el tiempo medio entre colisiones una molécula de  $N_2$ ?

- a)  $2.81 \cdot 10^{-24} \text{ s}$
- b) 17.2 ns
- c)  $1.77 \cdot 10^{-8} \text{ s}$
- d) 649 ns

El tiempo entre colisiones es la inversa de la frecuencia de colisión. En este caso una molécula de nitrógeno colisiona con otras de nitrógeno y de dióxido de carbono:

$$\tau = \frac{1}{z_{11} + z_{12}} = \frac{1}{1.54 \cdot 10^6 + 5.65 \cdot 10^7} = 1.72 \cdot 10^{-8} \text{ s}$$

Pasando el resultado a nanosegundos son 17.2 ns

Respuesta: **b**

**1.5.** Se tiene un depósito de  $N_2$  ( $M=28\text{g/mol}$ ) a  $220\text{ K}$  y se sabe que la frecuencia de colisión de una determinada molécula de  $N_2$  con otras moléculas de  $N_2$  es de  $1.54 \cdot 10^6\text{ s}^{-1}$  y que el número de colisiones por segundo y  $\text{cm}^3$  entre moléculas de  $N_2$  es de  $4.78 \cdot 10^{21}\text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ . El recorrido libre medio para una molécula de  $N_2$  es:

- a)  $8,53 \cdot 10^{-23}\text{ m}$
- b)  $1,32 \cdot 10^{-4}\text{ m}$
- c)  $8,53 \cdot 10^{-20}\text{ m}$
- d)  $2,65 \cdot 10^{-4}\text{ m}$

El recorrido libre medio es el cociente entre la velocidad media y la frecuencia de colisiones:

$$\lambda = \frac{\langle v \rangle}{z} = \frac{\left( \frac{8RT}{\pi M} \right)^{1/2}}{1.54 \cdot 10^6} = \frac{407.9}{1.54 \cdot 10^6} = 2.65 \cdot 10^{-4}\text{ m}$$

Respuesta: **d**

**2.1)** Calcular el valor de la energía cinética de traslación más probable en función de la temperatura para un gas de masa molecular  $M_r$

$$G(\varepsilon) = 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}$$

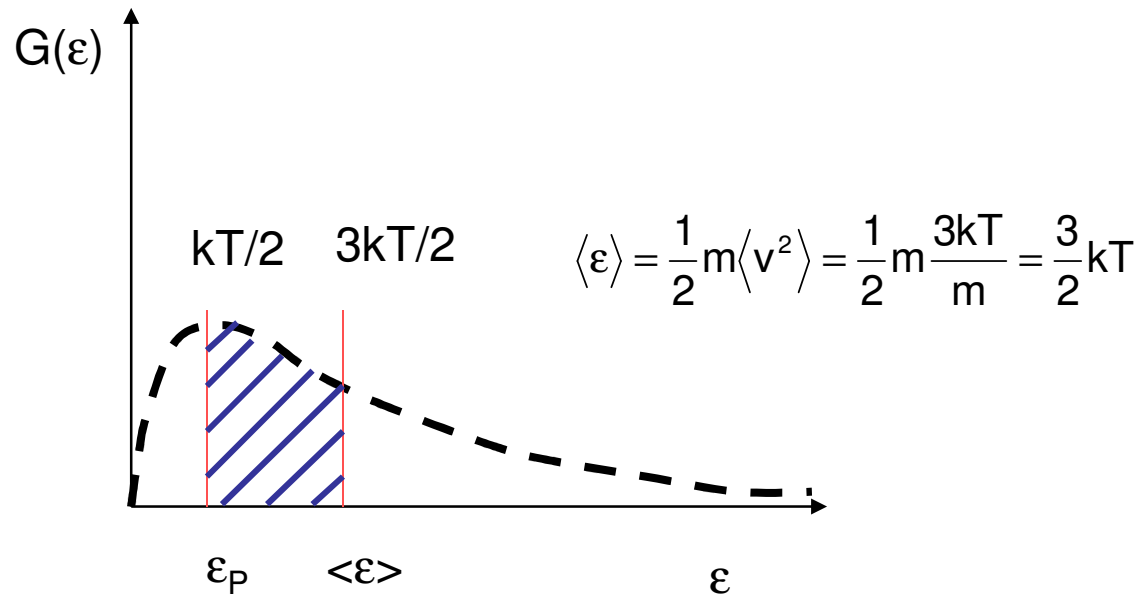
$$\left( \frac{\partial G(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon_P} = 0$$

$$\frac{\partial G(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} \frac{1}{2} \varepsilon^{-1/2} - 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \frac{1}{k_B T} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}$$

$$2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} \frac{1}{2} \varepsilon^{-1/2} - 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \frac{1}{k_B T} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} = 0$$

$$2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} \left[ \frac{\varepsilon^{-1/2}}{2} - \frac{\varepsilon^{1/2}}{k_B T} \right] = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} = 0 \quad \varepsilon = \infty \\ \left[ \frac{\varepsilon^{-1/2}}{2} - \frac{\varepsilon^{1/2}}{k_B T} \right] = 0 \end{array} \right. \quad \boxed{\varepsilon_P = \frac{k_B T}{2}}$$

2.2) ¿Cual será la proporción de moléculas del gas que tengan energía translacional,  $\epsilon$ , entre el valor más probable y el valor medio  $\langle \epsilon \rangle$  a la temperatura de  $54^\circ\text{C}$ ? Si lo necesitáis podéis utilizar el cambio de variable  $x = \sqrt{\epsilon}$  para resolver la integral.



$$\frac{N_{\epsilon}(\epsilon_p \leq \epsilon \leq \langle \epsilon \rangle)}{N} = \int_{\epsilon_p}^{\langle \epsilon \rangle} dp(\epsilon) = \int_{kT/2}^{3kT/2} G(\epsilon) d\epsilon$$

$$\frac{N_{\epsilon}(\epsilon_p \leq \epsilon \leq \langle \epsilon \rangle)}{N} = \int_{kT/2}^{3kT/2} 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2} e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} d\epsilon$$

$x^2 = \epsilon$   
 $2x dx = d\epsilon$

$$\frac{N_{\epsilon}(\epsilon_p \leq \epsilon \leq \langle \epsilon \rangle)}{N} = 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_{kT/2}^{3kT/2} \epsilon^{1/2} e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} d\epsilon = 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_{(kT/2)^{1/2}}^{(3kT/2)^{1/2}} x e^{-\frac{x^2}{k_B T}} 2x dx$$

$$\frac{N_\varepsilon(\varepsilon_P \leq \varepsilon \leq \langle \varepsilon \rangle)}{N} = 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_{kT/2}^{3kT/2} \varepsilon^{1/2} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} d\varepsilon = 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_{(kT/2)^{1/2}}^{(3kT/2)^{1/2}} x e^{-\frac{x^2}{k_B T}} 2x dx$$

$$\frac{N_\varepsilon(\varepsilon_P \leq \varepsilon \leq \langle \varepsilon \rangle)}{N} = 4\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_{(kT/2)^{1/2}}^{(3kT/2)^{1/2}} x^2 e^{-\frac{x^2}{k_B T}} dx$$

$$\frac{N_\varepsilon(\varepsilon_P \leq \varepsilon \leq \langle \varepsilon \rangle)}{N} = 4\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \left[ \int_0^{(3kT/2)^{1/2}} x^2 e^{-\frac{x^2}{k_B T}} dx - \int_0^{(kT/2)^{1/2}} x^2 e^{-\frac{x^2}{k_B T}} dx \right]$$

$$\frac{N_\varepsilon(\varepsilon_P \leq \varepsilon \leq \langle \varepsilon \rangle)}{N} = 4\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \left[ \frac{\frac{\sqrt{\pi}}{4 \left( \frac{1}{k_B T} \right)^{3/2}} \operatorname{erf} \left[ \left( \frac{1}{k_B T} \right)^{1/2} \left( \frac{3k_B T}{2} \right)^{1/2} \right]}{\frac{\left( \frac{3k_B T}{2} \right)^{1/2}}{2 \left( \frac{1}{k_B T} \right)} e^{-\left( \frac{3k_B T}{2} \right) \left( \frac{1}{k_B T} \right)}} - \frac{\frac{\sqrt{\pi}}{4 \left( \frac{1}{k_B T} \right)^{3/2}} \operatorname{erf} \left[ \left( \frac{1}{k_B T} \right)^{1/2} \left( \frac{k_B T}{2} \right)^{1/2} \right]}{\frac{\left( \frac{k_B T}{2} \right)^{1/2}}{2 \left( \frac{1}{k_B T} \right)} e^{-\left( \frac{k_B T}{2} \right) \left( \frac{1}{k_B T} \right)}} \right]$$

$$\frac{N_{\varepsilon}(\varepsilon_P \leq \varepsilon \leq \langle \varepsilon \rangle)}{N} = 4\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \left[ \begin{aligned} & \frac{\sqrt{\pi}}{4 \left( \frac{1}{k_B T} \right)^{3/2}} \operatorname{erf} \left[ \left( \frac{3}{2} \right)^{1/2} \right] - \left( \frac{3}{8} \right)^{1/2} (k_B T)^{3/2} e^{-\left( \frac{3}{2} \right)} - \\ & - \frac{\sqrt{\pi}}{4 \left( \frac{1}{k_B T} \right)^{3/2}} \operatorname{erf} \left[ \left( \frac{1}{2} \right)^{1/2} \right] + \left( \frac{1}{8} \right)^{1/2} (k_B T)^{3/2} e^{-\left( \frac{1}{2} \right)} \end{aligned} \right]$$

$$\frac{N_{\varepsilon}(\varepsilon_P \leq \varepsilon \leq \langle \varepsilon \rangle)}{N} = \operatorname{erf} \left[ \left( \frac{3}{2} \right)^{1/2} \right] - \sqrt{\frac{6}{\pi}} e^{-\left( \frac{3}{2} \right)} - \operatorname{erf} \left[ \left( \frac{1}{2} \right)^{1/2} \right] + \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\left( \frac{1}{2} \right)}$$

$\frac{N_{\varepsilon}(\varepsilon_P \leq \varepsilon \leq \langle \varepsilon \rangle)}{N} = 0.4096$
---

3. En un recipiente cúbico de 30 cm de lado se tiene a 300K y 1 atm de presión una mezcla equimolecular de nitrógeno ( $M=28\text{g/mol}$ ;  $d=3.7 \text{ \AA}$ ) y dióxido de carbono ( $M=44 \text{ g/mol}$ ;  $d=4.6\text{\AA}$ ).

3.1) Calcular el recorrido libre medio de las moléculas de  $\text{CO}_2$ .

$$\lambda_2 = \frac{\langle v_2 \rangle}{z_{21} + z_{22}}$$

$$\langle v_2 \rangle = \left( \frac{8kT}{\pi m_2} \right)^{1/2} = 379.95 \quad \text{m/s}$$

$$z_{21} = \pi d_{12}^2 \left( \frac{8kT}{\pi \mu} \right)^{1/2} \frac{N_2}{V} = 4.032 \cdot 10^9 \quad \text{s}^{-1}$$

$$z_{22} = \sqrt{2} \pi d_2^2 \left( \frac{8kT}{\pi m_2} \right)^{1/2} \frac{N_2}{V} = 4.369 \cdot 10^9 \quad \text{s}^{-1}$$

$$\lambda_2 = \frac{\langle v_2 \rangle}{z_{22} + z_{21}} = 4.523 \cdot 10^{-8} \quad \text{m} = 452.3 \quad \text{Angstroms}$$

**3.2)** En un momento dado se practica en el centro de una de las caras un orificio circular de 0.2 mm de radio mientras en el exterior se mantiene el vacío. Calcular la velocidad inicial de efusión de ambos gases como número de moléculas que se escapan por unidad de tiempo.

$$\frac{dN}{dt} = -A_{\text{or}} Z_P = -A_{\text{or}} \frac{1}{4} \frac{N}{V} \langle v \rangle = -\frac{A_{\text{or}} P}{(2\pi m k T)^{1/2}}$$

$$\frac{dN_1}{dt} = -A_{\text{or}} Z_P = -\frac{\pi r^2 P_1}{(2\pi m_1 k T)^{1/2}} = -1.83 \cdot 10^{20} \quad \text{s}^{-1}$$

$$\frac{dN_2}{dt} = -A_{\text{or}} Z_P = -\frac{\pi r^2 P_2}{(2\pi m_2 k T)^{1/2}} = -1.46 \cdot 10^{20} \quad \text{s}^{-1}$$

**3.3)** Calcular el tiempo necesario que debe de transcurrir para que en el interior del recipiente quede una mezcla de gases en la proporción molar 40:60.

$$\frac{dN_i}{dt} = -\frac{1}{4} \frac{N_i}{V} \langle v_i \rangle \pi r^2$$

$$\frac{dN_i}{N_i} = -\frac{1}{4} \frac{\pi r^2}{V} \left( \frac{8RT}{\pi M_i} \right)^{1/2} dt \quad \Rightarrow \quad \int_{N_{0,i}}^{N_i} \frac{dN_i}{N_i} = -\frac{1}{4} \frac{\pi r^2}{V} \left( \frac{8RT}{\pi M_i} \right)^{1/2} \int_0^t dt$$

Tendremos una ecuación para cada gas:

$$N_1 = N_{0,1} \cdot \exp \left[ -\frac{1}{4} \frac{\pi r^2}{V} \left( \frac{8RT}{\pi M_1} \right)^{1/2} t \right]$$

$$N_2 = N_{0,2} \cdot \exp \left[ -\frac{1}{4} \frac{\pi r^2}{V} \left( \frac{8RT}{\pi M_2} \right)^{1/2} t \right]$$

Si tomamos el cociente entre ambas expresiones y teniendo en cuenta que inicialmente teníamos una mezcla equimolar:

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{N_{0,1}}{N_{0,2}} \cdot \exp \left[ -\frac{l \pi r^2}{4 V} \left( \frac{8RT}{\pi} \right)^{1/2} \left( \left( \frac{l}{M_1} \right)^{1/2} - \left( \frac{l}{M_2} \right)^{1/2} \right) t \right]$$

Y de esta ecuación podemos despejar el tiempo t necesario para que la mezcla quede 40:60

$$\frac{40}{60} = \exp \left[ -\frac{l \pi r^2}{4 V} \left( \frac{8RT}{\pi} \right)^{1/2} \left( \left( \frac{l}{M_1} \right)^{1/2} - \left( \frac{l}{M_2} \right)^{1/2} \right) t \right]$$

$$\ln \frac{40}{60} = -\frac{l \pi r^2}{4 V} \left( \frac{8RT}{\pi} \right)^{1/2} \left( \left( \frac{l}{M_1} \right)^{1/2} - \left( \frac{l}{M_2} \right)^{1/2} \right) t$$

$$t = 1463 \text{ s}$$

- 4.1.-** La viscosidad del N<sub>2</sub> gas se determina comparando la velocidad con que fluye a través de un tubo largo y estrecho con la del argón. Para la misma presión inicial y final, circulo a través de un mismo tubo, en 94.3 s la misma cantidad (medida en gramos) de N<sub>2</sub> que de argón en 82 s. La viscosidad del argón a 25°C es 225 μP. Calcular:
- La viscosidad del N<sub>2</sub> a 25°C en unidades del S. I.
  - El diámetro molecular del N<sub>2</sub> (Mr =28) en metros.

La ecuación de Poiseuille integrada para gases es:

$$\frac{\Delta m}{\Delta t} = -\frac{\pi r^4 M}{16\eta RT} \frac{P_f^2 - P_i^2}{z_f - z_i}$$

Teniendo en cuenta que se trata de un mismo tubo e igualdad de presiones, para el argón y el nitrógeno, podremos escribir

$$\frac{\Delta m_{Ar}}{\Delta t_{Ar}} = -\frac{\pi r^4 M_{Ar}}{16\eta_{Ar} RT} \frac{P_f^2 - P_i^2}{z_f - z_i}$$

$$\frac{\Delta m_{N_2}}{\Delta t_{N_2}} = -\frac{\pi r^4 M_{N_2}}{16\eta_{N_2} RT} \frac{P_f^2 - P_i^2}{z_f - z_i}$$

Sabiendo que la cantidad que circula (en masa) es la misma, dividiendo ambas expresiones:

$$\frac{\Delta t_{Ar}}{\Delta t_{N_2}} = \frac{\eta_{Ar}}{\eta_{N_2}} \frac{M_{N_2}}{M_{Ar}}$$

Quedando:

$$\eta_{N_2} = \eta_{Ar} \frac{M_{N_2}}{M_{Ar}} \frac{\Delta t_{N_2}}{\Delta t_{Ar}} = 225 \frac{28}{40} \frac{94.3}{82} = 181.1 \mu P = 1.811 \cdot 10^{-5} Pa \cdot s$$

De acuerdo con la teoría cinética de gases:

$$\eta = \frac{5\pi PM}{32 RT} \frac{1}{\sqrt{2\pi d^2}} \frac{RT}{PN_A} \left( \frac{8RT}{\pi M} \right)^{1/2} = \frac{5}{16\sqrt{\pi}} \frac{(MRT)^{1/2}}{N_A d^2}$$

Sustituyendo:

$$\eta_{N_2} = 1.811 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$$

$$M_{N_2} = 28 \cdot 10^{-3} \text{ Kg}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$T = 298.15 \text{ K}$$

$$R = 8.3145 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$d = 3.67 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 3.67 \text{ \AA}$$

- 4.2.-**      **a)** Calcular la conductividad térmica del  $N_2$  a 298.15 K y 15 mbar de presión.  
              **b)** Si el  $N_2$  está encerrado en un cubo de 10 cm de lado, encontrándose una de las caras a 305 K y la cara opuesta a 295 K, ¿cuál será el flujo de energía en forma de calor entre las dos caras al alcanzar el estado estacionario?

De acuerdo con la teoría cinética de gases:

$$\kappa = \frac{25}{32} \left( \frac{RT}{\pi M} \right)^{1/2} \frac{1}{N_A d^2} C_{v,m}$$

$$d = 3.67 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$M_{N_2} = 28 \cdot 10^{-3} \text{ Kg} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$T = 298.15 \text{ K}$$

$$R = 8.3145 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

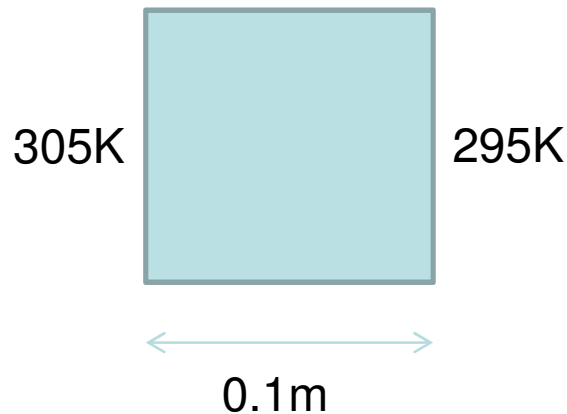
Necesitamos la capacidad calorífica molar a volumen cte. De acuerdo con el principio de equipartición, para una molécula diatómica, suponiendo que la vibración está no activada a 298.15 K, podremos escribir:

$$C_{v,m} = C_{v,m,tras} + C_{v,m,rot} = \frac{3}{2} R + \frac{2}{2} R = \frac{5}{2} R$$

Sustituyendo todos los valores nos queda:

$$\kappa = 3.36 \cdot 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

**b)** Si el  $\text{N}_2$  está encerrado en un cubo de 10 cm de lado, encontrándose una de las caras a 305 K y la cara opuesta a 295 K, ¿cuál será el flujo de energía en forma de calor entre las dos caras al alcanzar el estado estacionario?



$$\frac{1}{A} \frac{dQ}{dt} = -\kappa \frac{dT}{dz} \quad \text{Ley de Fourier}$$

$$\frac{dQ}{dt} = -\kappa A \frac{dT}{dz}$$

$$\kappa = 3.36 \cdot 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$A = 10^{-2} \text{ m}^2$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{295 - 305}{0.1} = -10^2 \text{ K} \cdot \text{m}^{-1}$$

$$\left. \begin{array}{l} \kappa = 3.36 \cdot 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \\ A = 10^{-2} \text{ m}^2 \\ \frac{dT}{dz} = \frac{295 - 305}{0.1} = -10^2 \text{ K} \cdot \text{m}^{-1} \end{array} \right\} \frac{dQ}{dt} = -3.36 \cdot 10^{-2} \cdot 10^{-2} \cdot (-10^2) = 3.36 \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$$

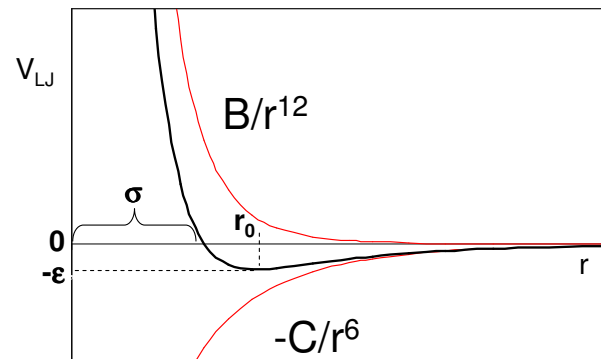
5. La interacción entre las moléculas de una determinada sustancia puede describirse aproximadamente mediante un potencial de Lennard-Jones en el cual

$$B = 1.622 \times 10^{-110} \text{ J} \times \text{mol}^{-1} \times \text{m}^{12} \text{ y } C = 8.824 \times 10^{-54} \text{ J} \times \text{mol}^{-1} \times \text{m}^6$$

5.1. Calcula el diámetro molecular  $\sigma$ .

$$V_{LJ}(r) = \frac{B}{r^{12}} - \frac{C}{r^6}$$

Potencial de Lennard-Jones



5.1.  $\sigma$  es el valor de la distancia para el que el potencial LJ se anula.

$$V_{LJ}(r = \sigma) = \frac{B}{\sigma^{12}} - \frac{C}{\sigma^6} = 0$$

Despejando:

$$\sigma = \left( \frac{B}{C} \right)^{1/6} = 3.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

**5.2.** ¿Cuál es la fuerza que sienten un par de moléculas cuando se encuentran a la distancia de contacto? ¿A qué distancia se anula la fuerza?

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}V_{\text{int}} \quad \Rightarrow \quad F = -\frac{dV_{LJ}(r)}{dr} = \frac{12B}{r^{13}} - \frac{6C}{r^7}$$

La fuerza a la distancia de contacto será:

$$F(r = \sigma) = \frac{12B}{\sigma^{13}} - \frac{6C}{\sigma^7}$$

$$F(r = \sigma) = \frac{12 \cdot 1.622 \cdot 10^{-110}}{(3.5 \cdot 10^{-10})^{13}} - \frac{6 \cdot 8.824 \cdot 10^{-54}}{(3.5 \cdot 10^{-10})^7}$$

$$F(r = \sigma) = 8.27 \cdot 10^{13} \text{ N} \cdot \text{mol}^{-1} = 1.37 \cdot 10^{-10} \text{ N}$$

La distancia a la que la fuerza se anula es  $r_0$ , la posición del mínimo

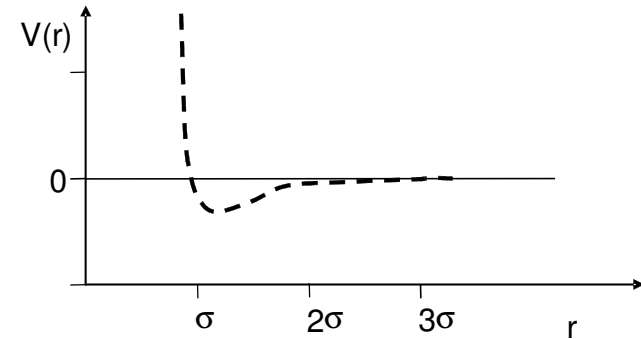
$$F(r = r_0) = \frac{12B}{r_0^{13}} - \frac{6C}{r_0^7} = 0$$

$$r_0 = \left( \frac{2B}{C} \right)^{1/6} = 2^{1/6} \cdot \sigma = 3.93 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

**5.3.** Dibuja de forma aproximada la forma que tendría la función de distribución radial de esta sustancia en estado gaseoso diluido pero real a 298K. ¿A qué distancia y qué altura presentarían los picos de dicha función en caso de haberlos?

*Gas real diluido*

$$g(r) = e^{-V_{\text{int}}(r)/kT}$$



El máximo de  $g(r)$  aparece en el mínimo de  $V_{LJ}$ , es decir en  $r_0$

En ese punto  $V$  vale:

$$V_{LJ}(r_0) = \frac{B}{r_0^{12}} - \frac{C}{r_0^6} = -1200 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}$$

Y  $g(r)$  será:

$$g(r_0) = \exp\left(-\frac{V_{LJ}(r_0)}{RT}\right) = \exp\left[-\frac{1200 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}}{8.3145 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}\cdot 298 \text{ K}}\right] = 1.62$$

