

APELLIDOS.....NOMBRE.....  
GRUPO: .....

=====

**NOTA : No se permite el uso de libros, formularios o cualquier otra documentación.**

1. El átomo de cloro neutro posee un estado electrónico fundamental  $^2P_{3/2}$  y un estado excitado de baja energía  $^2P_{1/2}$  a  $881\text{ cm}^{-1}$ .

1.1. Calcula la función de partición electrónica del átomo de cloro a 0 Kelvin, 5000 Kelvin y cuando  $T \rightarrow \infty$ .

1.2. La molécula de HCl presenta una constante rotacional  $\bar{B}=10.6\text{ cm}^{-1}$  y una frecuencia vibracional fundamental de  $\bar{\nu}=2990\text{ cm}^{-1}$ . Calcula la función de partición molecular molar estándar a 0 y 5000 Kelvin.

1.3. Sabiendo que la energía de disociación del enlace HCl es de 432 kJ/mol, calcula la constante del equilibrio  $\text{HCl (g)} \rightarrow \text{Cl (g)} + \text{H (g)}$  a 5000 Kelvin.

Datos:  $\text{Mr(Cl)}=35.45$ ;  $\text{Mr(H)}=1.008$

2. Marque sin ambigüedad la respuesta correcta de cada apartado, sabiendo que cada contestación correcta vale 2 puntos y cada respuesta incorrecta descontara 0.6 puntos.

2.1 El mínimo de la curva del potencial de Lennard Jones:

- a) Nos indica a que distancia la fuerza entre dos moléculas es mínima.
- b) Nos indica a que distancia la fuerza entre dos moléculas es cero.
- c) Nos indica a que distancia la energía potencial entre dos moléculas es cero.

2.2 Para moléculas no cargadas:

- a) Las fuerzas repulsivas son de más corto alcance que las atractivas.
- b) Las fuerzas repulsivas son de más largo alcance que las atractivas.
- c) Dependiendo del caso la respuesta a o b será la correcta.

2.3 Si el factor de compresibilidad es mayor que uno, podemos decir que:

- a) las fuerzas atractivas dominan.
- b) habría que saber la temperatura del sistema para saber cual domina.
- c) las fuerzas repulsivas dominan.

2.4 La función de distribución radial para moléculas monoatómicas:

- a) tiende a cero a distancias grandes.
- b) tiende a uno a distancias grandes.
- c) tiende al valor de la densidad macroscópica a distancias grandes.

2.5 Referente a la capacidad calorífica de los sólidos:

- a) Según el modelo de Einstein la capacidad calorífica de los sólidos depende de la temperatura.
- b) Según el modelo de Debye la capacidad calorífica de los sólidos no depende de la temperatura.
- c) Según la mecánica clásica la capacidad calorífica de los sólidos depende de la temperatura.

3. En un trabajo de investigación sobre la TCG unos científicos encontraron la siguiente expresión:

$$\frac{\langle \varepsilon^2 \rangle}{\varepsilon_{mp}} - \langle \varepsilon \rangle$$

donde  $\varepsilon$  es la energía cinética de traslación de una molécula, de un gas monoatómico, de masa  $m$  y  $\varepsilon_{mp}$  el valor más probable de la energía cuando el gas está a una temperatura  $T$ .

Calcular: **a)** el valor de dicha expresión y su dependencia respecto a  $T$  y  $M$ .

**b)** cuál será la proporción de moléculas del gas que tendrán una energía traslacional,  $\varepsilon$ , entre el valor más probable,  $\varepsilon_{mp}$ , y el valor medio,  $\langle \varepsilon \rangle$ , a la temperatura de  $54^\circ\text{C}$ .

En caso de calcular la función de error de la variable  $z$ ,  $\text{Erf}[z]$ ,  $z$  será tomada con solo las dos primeras cifras decimales. Así no es necesario la interpolación lineal. Si es necesario se puede realizar el cambio de variable  $x = \sqrt{\varepsilon}$ . La ley de distribución de energías traslacionales de gases monoatómicos (Maxwell-

Boltzmann) es:  $f(\varepsilon) = 2\pi \left( \frac{1}{\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}$

4. Responda de una forma escueta pero razonada a las siguientes preguntas.

**4.1** Se tiene una conducción de forma cilíndrica de 20 m de longitud por la que circula un líquido con un caudal de 10 L/s. La presión al inicio del tubo es el doble que en la salida. ¿Cuanto aumentará el caudal si triplicamos la presión al inicio de la conducción?

**4.2** Se tiene dos depósitos de calor uno a 275 K y otro a 325 K. Estos se comunican a través de una varilla cilíndrica de hierro ( $\kappa = 0.80 \text{ J K}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) de 200 cm de longitud. La varilla está debidamente aislada para que no haya pérdidas de calor. En un minuto se transportan 288 J cuando el sistema ha alcanzado el régimen estacionario. ¿Cuánto vale el diámetro de la varilla?

**4.3** Según la expresión obtenida con la teoría cinética de gases ¿cómo varía el coeficiente de autodifusión al aumentar la presión?

**4.4** Se introduce un terrón de azúcar (4 moles) en agua (100L). A que distancia del punto inicial se encontrara la máxima concentración de azúcar al cabo de 10 horas. El coeficiente de difusión vale  $10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . La solución de la segunda ley de Fick para este sistema nos da:

$$c(r,t) = \frac{n_0}{8(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}}$$

### **DATOS ADICIONALES:**

$$D_{jj} = \frac{3\pi}{16} \langle v \rangle \lambda \quad \langle v \rangle = \left( \frac{8RT}{\pi M} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \lambda = \frac{V}{\sqrt{2} \pi d^2 N} \quad K_p = \exp(-\Delta U_r(0)/RT) \prod_j \left( \frac{q_{j,m}^0}{N_A} \right)^{\nu_j}$$

$$q_{tras} = \left( \frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} V \quad q_{rot}(\text{diatómicas}) = \frac{kT}{\sigma h B} = \frac{kT}{\sigma h c \bar{B}} \quad q_{vib}(\text{diatómicas}) = \frac{1}{1 - \exp(-h\nu/kT)}$$

$$1 \text{ Debye} = 3.33564 \cdot 10^{-30} \text{ Cm}$$

$$1 \text{ cal} = 4.184 \text{ J}$$

$$R = 8.31451 \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\varepsilon_0 = 8.8541878 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$$

$$N_A = 6,02214 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$h = 6.62608 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$k = 1.38066 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$$

$$c = 2,9979 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

$$P^0 = 10^5 \text{ Pa}$$