

**SR1.-** Calcular la energía de interacción de dispersión para dos moléculas situadas a 5 Å, en los siguientes casos.

Molécula	$\alpha \cdot 10^{24}(\text{cm}^3)$	I(Kcal/mol)	$T_{\text{eb}}(\text{K})$
Ne	0.392	497.2	27.3
Ar	1.63	363.3	87.3
Kr	2.46	322.7	119.9
Xe	4.01	279	165.1

Comparar el resultado obtenido con la temperatura de ebullición normal.

Sol.: -3.67E-3; -4.63E-2; -9.37E-2; -21.6E-2 Kcal/mol

**SR2.-** Justificar, para el caso del Argón en el problema anterior, por qué se ignoran habitualmente las fuerzas gravitacionales. Considerar que la distancia mínima de acercamiento, dada por el diámetro molecular, es de 5.72 Å.

**SR3.-** Sabiendo la polarizabilidad del Argón (problema 1) y el momento dipolar del agua (1.85 Debyes), calcular a) la energía de interacción dipolo-dipolo inducido a la distancia de contacto. Para ello considerar ambas moléculas como esferas con diámetros rígidos de 3.08 Å para el argón y 2.76 Å para el agua. b) Si la polarizabilidad de volumen del agua es de  $1.45 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3$  y los potenciales de ionización del agua y argón son respectivamente 12.6 y 15.8 eV ¿cuál es la energía de interacción atractiva total ?.

Sol: a) -0.54 kJ/mol b) -4.41 kJ/mol.

**SR4.-** Suponga que la interacción entre dos moléculas tiene la forma  $V(r)=B/r^m -C/r^n$ . Mostrar que una condición necesaria para que  $V(r)$  tenga un mínimo es que las fuerzas repulsivas sean de menor alcance que las atractivas (es decir, que  $m>n$ ).

**SR5.-** El potencial de Lennard-Jones tiene la forma general  $V_{LJ}=-C/r^6 + B/r^{12}$ . Expresar el potencial en términos de  $\epsilon$  ( $-\epsilon$  es el valor de la energía en el mínimo de la curva de interacción) y  $r_0$  (distancia de separación en el mínimo), así como de  $\epsilon$  y  $\sigma$  (distancia cuando  $V_{LJ}=0$ ).

**SR6.-** Calcular la fuerza entre dos moléculas de metano separadas a) 8 Å b) 5 Å y c) 3 Å si la interacción obedece a un potencial de Lennard-Jones con parámetros  $\epsilon = 0.013 \text{ eV}$  y  $\sigma=3.8 \text{ Å}$ . d) ¿Cuándo se anula la fuerza?

Sol.: a) -7.01E-13 N b) -1.18E-11 N c) 4.99E-9 N d) si  $r=4.265 \text{ Å}$ .

**SR7.-** La energía de interacción del sistema  $\text{H}_2\text{O}-\text{CCl}_4$  en el mínimo de la curva de Lennard-Jones es de  $-0.10 \text{ kJmol}^{-1}$ . Determinar la distancia de equilibrio teniendo en cuenta que las interacciones atractivas de este sistema son la suma de interacciones dipolo-dipolo inducido y dipolo inducido-dipolo inducido. Datos:

Molécula	$\alpha \cdot 10^{24}(\text{cm}^3)$	$\mu(\text{D})$	I (eV)
$\text{H}_2\text{O}$	1.45	1.85	12.6
$\text{CCl}_4$	11.2	0.	11.5

Sol.: 6.59 Å.

**SR8.-** Conocidos los valores para la densidad de la trimetilamina gaseosa en función de la presión, a la temperatura de 0 °C:

<b>P(atm)</b>	0.2	0.4	0.6	0.8
<b><math>\rho(\text{g l}^{-1})</math></b>	0.5336	1.0790	1.6363	2.2054

Calcular el segundo coeficiente del virial y el peso molecular.

Sol.:  $B(T)=-1.1297 \text{ l/mol}$   $M=59.16 \text{ gmol}^{-1}$

**SR9..** Para estudiar el comportamiento de una determinada sustancia a  $T=65 \text{ K}$  se necesita describir las interacciones que aparecen entre las moléculas que la forman. Para ello se elige un potencial de la forma

$$V(r) = \begin{cases} = \infty & r < \sigma \\ = -\frac{C}{r^6} & r \geq \sigma \end{cases}$$

- a) Determinar el valor de C de la anterior expresión teniendo en cuenta las siguientes propiedades de las moléculas.  
 b) Para un amplio intervalo de presiones, el comportamiento en fase gas de esta sustancia

$\mu(D)$	$\alpha'(cm^3)$	I (kcal/mol)
0.4	$1.5 \cdot 10^{-24}$	50

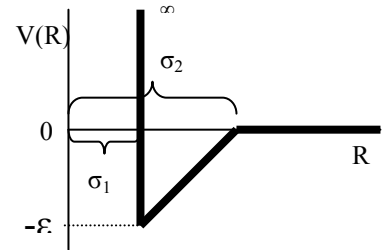
viene adecuadamente descrito por la siguiente función de estado:  $\frac{PV_m}{RT} = 1 + \frac{B(T)}{V_m}$ .

Sabiendo que el gas muestra un comportamiento ideal a  $T=65K$  (temperatura de Boyle) determinar el valor de  $\sigma$  en la expresión del potencial intermolecular.

(Nota: suponer que  $kT \gg V(r)$  y que por lo tanto  $e^{-\frac{V(r)}{kT}} \approx 1 - \frac{V(r)}{kT}$ )

Sol:  $C=8.24 \cdot 10^{-79} J m^6$ ;  $\sigma=3.12 \text{ \AA}$

SR10.- Calcular la expresión del segundo coeficiente del virial para un gas cuyo potencial de interacción tiene la forma:

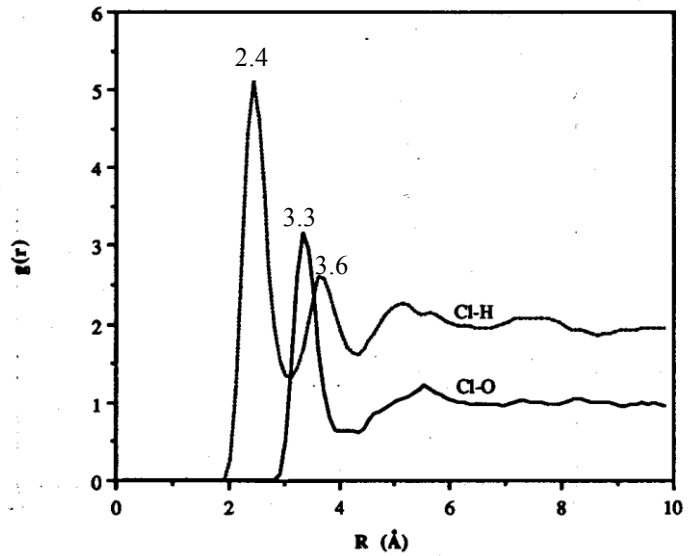


SR11.- Considere un cristal de N átomos. La energía vibracional de cada modo normal puede ser escrita como  $\epsilon=xhv$ , donde x puede tomar cualquier valor continuo entre 0 y  $+\infty$ . Además, como en el tratamiento de Einstein sólo es posible una única frecuencia vibracional v. Calcular: a) la función de partición del cristal, b) la energía vibracional c) la capacidad calorífica del cristal.

SR12.- Para un determinado líquido a  $25^\circ$  el volumen molar es de  $60 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$  y la integral de la función  $r^2g(r)$  entre 0 y el primer mínimo de la función de distribución radial del líquido vale  $80 \text{ \AA}^3$ . Calcular el número de coordinación.

Sol.:  $N=10$

SR13.- La siguiente figura muestra las funciones de distribución radial, calculadas mediante dinámica molecular para el anión cloruro en agua (Cl-O y Cl-H). A partir de ellas deducir cómo se disponen, en término medio, las moléculas de agua en la primera capa de solvatación. ¿Cómo podría calcularse a partir de la función de distribución el número de moléculas que forman esta primera capa de solvatación?



SR14.- En la siguiente figura se dan las funciones de distribución para el catión  $Na^+$  en agua (Na-O y Na-H). Deducir la disposición de las moléculas de agua en la primera capa de solvatación. Entre el primer y el segundo pico de la función Na-O aparece un mínimo muy pronunciado, ¿cuál sería el significado físico de que este mínimo llegase a  $g(r)=0$ ?, ¿en qué casos puede esperarse este comportamiento?.

