QUIMICA FISICA AVANZADA 2010/2011 TUTORIA Nº 1

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 $T \to \infty$.

c) Para un sistema formado por 10^{20} partículas iguales e indistinguibles, con 10^{20} estados moleculares accesibles, se puede utilizar la expresión $Q=q^N/N!$ para calcular la función de partición del sistema.

d) Para una molécula con un estado nuclear, uno electrónico, seis traslacionales, cuatro rotacionales y cuatro vibracionales el número total de estados moleculares será 16.

2. ¿Cuál es la respuesta correcta?

2.1 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) $1/(10^{20})!$

2.2 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.

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

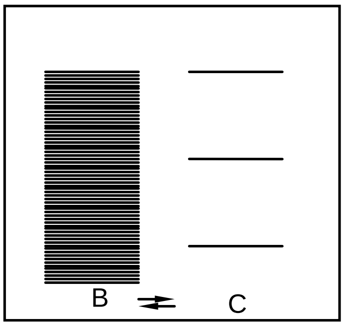
b) q_v es más exacta a medida que aumenta T y q_r es más exacta a medida que disminuye T.

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

2.3 En la siguiente figura se muestran los estados moleculares de dos sustancias en equilibrio. Hacia donde estará desplazado el equilibrio a temperaturas muy altas y muy bajas.

a) A temperatura alta hacia B y a temperatura baja hacia C.
b) A temperatura alta hacia C y a temperatura baja hacia B.
c) A temperatura alta hacia C y a temperatura baja hacia C.
d) A temperatura alta hacia B y a temperatura baja hacia B.



3.- Un sistema está formado por N partículas idénticas e independientes, cuyos niveles de energía dependen del número cuántico n de la forma $\varepsilon=b(n-1)$, donde b es una constante positiva con dimensiones de energía. Sabiendo que n toma valores enteros positivos (1, 2, 3, ...∞) y que la degeneración de los niveles es 2n:

a) Obtener la expresión de la función de partición de las partículas. ¿Cuál es el valor a T=0 K?. (Nota: para resolver este apartado puedes seguir los pasos empleados para deducir la función de partición traslacional)

b) A partir del resultado anterior, obtén una expresión aproximada de la función de partición para temperaturas altas. ¿Cuál es el valor si kT=1000b?.

c) Obtén una expresión para la energía interna molar del sistema en el límite de altas temperaturas

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

4. Al estudiar los ingresos mensuales de los trabajadores 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 trabajador de ese país?

c) Representa la función de distribución. Indique como determinaría la proporción de trabajadores del país que tienen ingresos mensuales menores que el valor medio? ¿y mayores?.

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

3: a) 2 a 0K. b) $2(kT/b)^2$. c) 2RT

4: a) C=1.6618E-8 $euros^{-3}$; b) 580 euros; d) 60766 $euros^2$.