

**1. Elige la respuesta correcta**

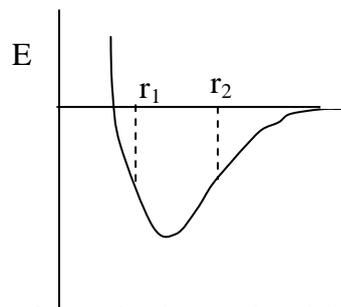
- 1.1. A presiones bajas de un gas, si el segundo coeficiente del virial  
 a) es mayor que cero, es que dominan las fuerzas atractivas  
 b) es menor que cero, es que dominan las fuerzas repulsivas  
 c) es igual a cero, es que se comporta como un gas cuasi-ideal.  
 d) Ninguna de las anteriores es cierta

- 1.2. La función de distribución radial puede tomar valores entre:  
 a) 1 y  $\infty$       b)  $-\infty$  y  $\infty$       c) 0 y  $\infty$ .      d) 0 y 1.

- 1.3. El factor de compresibilidad.  
 a) siempre aumenta cuando aumenta la presión.  
 b) siempre aumenta cuando aumenta la temperatura.  
 c) tiende a 1 cuando la presión tiende a cero a T=cte.  
 d) tiende a 1 cuando la temperatura tiende a cero a P=cte.

1.4. El valor de la energía potencial entre dos moléculas A y B varía con la distancia que hay entre ellas tal como se muestra en el dibujo. ¿Como serán las fuerzas que sienten las moléculas a las distancias  $r_1$  y  $r_2$ ?

- a) En 1 atractiva y en 2 repulsiva.  
 b) En 2 atractiva y en 1 repulsiva.  
 c) En 1 atractiva y en 2 atractiva  
 d) En 1 repulsiva y en 2 repulsiva



- 2.- Los átomos de sodio ( $M=22.99 \text{ g mol}^{-1}$ ), tienen términos electrónicos fundamentales doblete.  
 a) Calcular la función de partición molecular molar estándar para los átomos de sodio a  $T=1000\text{K}$ . ¿Cuánto valdría la función de partición molecular a  $T=0 \text{ K}$ ?  
 b) La molécula de  $\text{Na}_2$  tiene una energía de disociación  $D_0=70.4 \text{ kJ mol}^{-1}$  una constante rotacional de  $0.1547 \text{ cm}^{-1}$  y una vibración con  $\bar{\nu}=159.2 \text{ cm}^{-1}$ . Calcula la constante de equilibrio a  $T=1000\text{K}$  para la reacción  $\text{Na}_2(\text{g}) \leftrightarrow 2\text{Na}(\text{g})$ .

3. 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  $B r^{-12}$ , determine la posición del mínimo de energía entre dos moléculas de aguas ( $r_0$ ) si la energía de interacción a esa distancia es de  $-1.485 \text{ Kcal/mol}$

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.

4. Las frecuencias de vibración de un sólido pueden tratarse como una variable continua, ya que las muestras macroscópicas presentan un número muy grande de modos de vibración. En su estudio de las capacidades caloríficas de los sólidos Debye propuso caracterizar la distribución de frecuencias mediante la función:

$$g(\nu) = \begin{cases} A\nu^2 & \nu \leq \nu_{\max} \\ 0 & \nu > \nu_{\max} \end{cases}$$

donde  $\nu_{\max}$  es la frecuencia máxima de vibración del sólido y es consecuencia de su naturaleza discreta.

- Calcula A en función de la frecuencia máxima
- Determina la frecuencia media de vibración en función de la frecuencia máxima

*Respuestas:*

2: a)  $1.09 \cdot 10^{32}$  a  $1000 \text{ K}$  y 2 a  $0 \text{ K}$ . c) 2.45

3: a)  $V_{\text{atra}}(\text{J}) = -1.83 \cdot 10^{-77} / [r(\text{m})]^6$ ; b)  $3.1 \text{ \AA}$ ; c)  $-23.35 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$

4) a-  $A = \frac{3}{\nu_{\max}^3}$ ; b-  $0.75\nu_{\max}$ .