TERMODINAMICA ESTADISTICA AVANZADA

DOSSIER DE EJERCICIOS 1

UNIDAD 1

1a. Calcular el peso de la configuración en la cual 18 objetos se distribuyen en el rearreglo 0, 1, 2, 3, 8, 0, 0, 2, 0, 2.

1b. Calcular el peso de la configuración en la cual 20 objetos se distribuyen en el rearreglo 6, 0, 5, 0, 4, 1, 1, 0, 2, 0, 0, 1.

2a. ¿Cuál es la temperatura de un sistema de dos niveles (de energía) con una separación energética de 400 cm^{-1} cuando la población del estado más alto es un tercio de la del estado más bajo?

2b. ¿Cuál es la temperatura de un sistema de dos niveles (de energía) con una separación energética de 300 cm^{-1} cuando la población del estado más alto es la mitad de la del estado más bajo?

3a. Cierta molécula tiene un estado excitado no degenerado a 540 cm^{-1} sobre el estado basal no degenerado. ¿A qué temperatura estará el 10 por ciento de las moléculas en el estado más alto?

3b. Cierta molécula tiene un estado excitado doblemente degenerado a 360 cm^{-1} sobre el estado basal no degenerado. ¿A qué temperatura estará el 15 por ciento de las moléculas en el estado más alto?

4a. Calcular (a) la longitud de onda térmica y (b) la función de partición translacional a (i) 300 K y (ii) 3000 K de una molécula de masa molar 150 g mol^{-1} en un contenedor de volumen 1.00 cm^3.

4b. Calcular (a) la longitud de onda térmica y (b) la función de partición translacional de un átomo de Ne dentro de una caja cúbica de lado 1.00 cm a (i) 300 K y (ii) 3000 K.

5a. Calcular el radio de las funciones de partición translacionales de D_2 y H_2 a la misma temperatura y volumen.

5b. Calcular el radio de las funciones de partición translacionales de xenon y helio a la misma temperatura y volumen.

6a. La longitud del enlace de O_2 es 120.75 pm. Usar la aproximación de altas temperaturas para calcular la función de partición rotacional de la molécula a 300 K.

6b. La longitud del enlace de N_2 es 109.75 pm. Usar la aproximación de altas temperaturas para calcular la función de partición rotacional de la molécula a 300 K.

7a. La molécula NOF es un rotor asimétrico con constantes rotacionales 3.1752 cm^{-1}, 0.3951 cm^{-1} y 0.3505 cm^{-1}. Calcular la función de partición rotacional de la molécula a (a) 25°C y (b) 100°C.

7b. La molécula H_2O es un rotor asimétrico con constantes rotacionales 27.877 cm^{-1}, 14.512 cm^{-1} y 9.285 cm^{-1}. Calcular la función de partición rotacional de la molécula a (a) 25°C y (b) 100°C.

8a. La constante rotacional del CO es 1.931 cm^{-1}. Evaluar la función de partición rotacional explícitamente (sin aproximación) y graficar su valor como función de la temperatura. ¿A qué temperatura el valor es 5 por ciento del valor calculado con la fórmula aproximada?

8b. La constante rotacional del HI es 6.511 cm^{-1}. Evaluar la función de partición rotacional explícitamente (sin aproximación) y graficar su valor como función de la temperatura. ¿A qué temperatura el valor es 3 por ciento del valor calculado con la fórmula aproximada?

9a. La constante rotacional del CH_4 es 5.241 cm^{-1}. Evaluar la función de partición rotacional explícitamente (sin aproximación) y graficar su valor como función de la temperatura. ¿A qué temperatura el valor es 2 por ciento del valor calculado con la fórmula aproximada?

9b. La constante rotacional del CCl_4 es 0.0572 cm^{-1}. Evaluar la función de partición rotacional explícitamente (sin aproximación) y graficar su valor como función de la temperatura. ¿A qué temperatura el valor es 4 por ciento del valor calculado con la fórmula aproximada?

10a. Las constantes rotacionales del CH_3Cl son $\tilde{A}$ = 5.097 cm^{-1} y $\tilde{B}$ = 0.443 cm^{-1}. Evaluar la función de partición rotacional explícitamente (sin aproximación) y graficar su valor como función de la temperatura. ¿A qué temperatura el valor es 5 por ciento del valor calculado con la fórmula aproximada?

10b. Las constantes rotacionales del NH_3 son $\tilde{A}$ = 6.196 cm^{-1} y $\tilde{B}$ = 9.444 cm^{-1}. Evaluar la función de partición rotacional explícitamente (sin aproximación) y graficar su valor como función de la temperatura. ¿A qué temperatura el valor es 5 por ciento del valor calculado con la fórmula aproximada?

11a. El número de onda vibracional del Br_2 es 323.2 cm^{-1}. Evaluar la función de partición vibracional explícitamente (sin aproximación) y graficar su valor como función de la temperatura. ¿A qué temperatura el valor es 5 por ciento del valor calculado con la fórmula aproximada?

11b. El número de onda vibracional del I_2 es 214.5 cm^{-1}. Evaluar la función de partición vibracional explícitamente (sin aproximación) y graficar su valor como función de la temperatura. ¿A qué temperatura el valor es 5 por ciento del valor calculado con la fórmula aproximada?

12a. Calcular la función de partición vibracional del CS_2 a 500 K dados los números de onda 658 cm^{-1} (alargamiento simétrico), 397 cm^{-1} (torsión; dos modos) y 1535 cm^{-1} (alargamiento asimétrico).

12b. Calcular la función de partición vibracional del HCN a 900 K dados los números de onda 3311 cm^{-1} (alargamiento simétrico), 712 cm^{-1} (torsión; dos modos) y 2097 cm^{-1} (alargamiento asimétrico).

13a. Cierto átomo tiene un estado basal triplemente degenerado, un estado electrónicamente excitado no degenerado a 3500 cm^{-1} y un estado triplemente degenerado a 4700 cm^{-1}. Calcular la función de partición de éstos estados electrónicos a 1900 K.

13b. Cierto átomo tiene un estado basal doblemente degenerado, un estado electrónicamente excitado triplemente degenerado a 1250 cm^{-1} y un estado doblemente degenerado a 1300 cm^{-1}. Calcular la función de partición de éstos estados electrónicos a 2000 K.

14a. Calcular la contribución electrónica a la energía interna molar a 1900 K para una muestra compuesta de los átomos especificados en el ejercicio 13a.

14b. Calcular la contribución electrónica a la energía interna molar a 2000 K para una muestra compuesta de los átomos especificados en el ejercicio 13b.

15a. ¿A qué temperatura la población del primer estado excitado vibracional del HCl será 1/e veces su población del estado basal? ($\tilde{\nu} = 1889$ cm^{-1})

15b. ¿A qué temperatura la población del primer estado excitado rotacional del HCl será 1/e veces su población del estado basal? ($\tilde{B} = 21.18$ cm^{-1})

16a. Calcular la entropía molar estándar del gas neón a (a) 200 K y (b) 298.15 K.

16b. Calcular la entropía molar estándar del gas kriptón a (a) 100 K y (b) 298.15 K.

17a. Calcular la contribución vibracional a la entropía de Cl_2 a 500 K dado que el número de onda de la vibración es 560 cm^{-1}.

17b. Calcular la contribución vibracional a la entropía de Br_2 a 600 K dado que el número de onda de la vibración es 321 cm^{-1}.

$$hc\bar{B} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2}$$

Donde $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ y R = longitud de enlace.