

TERMODINAMICA ESTADISTICA AVANZADA

DOSSIER DE EJERCICIOS 2

- 1a. Evaluar la longitud de onda térmica del CO_2 a 25°C .
- 1b. Evaluar la longitud de onda térmica del SO_2 a 25°C .
- 2a. Evaluar la función de partición translacional del CO_2 a 25°C en un contenedor de volumen 1.0 cm^3 .
- 2b. Evaluar la función de partición translacional del SO_2 a 25°C en un contenedor de volumen 1.0 cm^3 .
- 3a. Estima la capacidad calorífica molar a volumen constante de (a) I_2 , (b) CH_4 , (c) C_6H_6 en la fase gas a 25°C .
- 3b. Estima la capacidad calorífica molar a volumen constante de (a) O_3 , (b) C_2H_6 , (c) CO_2 en la fase gas a 25°C .
- 4a. Evalúa la temperatura rotacional del HCl .
- 4b. Evalúa la temperatura rotacional del H_2 y del D_2 .
- 5a. Estima la función de partición rotacional del HCl a (a) 25°C y (b) 250°C .
- 5b. Estima la función de partición rotacional del O_2 a (a) 25°C y (b) 250°C .
- 6a. Da el número de simetría de cada una de las siguientes moléculas: (a) CO , (b) O_2 , (c) H_2S , (d) SiH_4 y (e) CHCl_3 .
- 6b. Da el número de simetría de cada una de las siguientes moléculas: (a) CO_2 , (b) O_3 , (c) SO_3 , (d) SiF_6 y (e) Al_2Cl_6 .
- 7a. Calcular la función de partición rotacional del H_2O a 298K de sus constantes rotacionales 27.878 cm^{-1} , 14.509 cm^{-1} y 9.287 cm^{-1} . ¿Por sobre qué temperatura es válida la aproximación de altas temperaturas dentro del 10% de su valor real?
- 7b. Calcular la función de partición rotacional del SO_2 a 298K de sus constantes rotacionales 2.02736 cm^{-1} , 0.34417 cm^{-1} y 0.293535 cm^{-1} . ¿Por sobre qué temperatura es válida la aproximación de altas temperaturas dentro del 10% de su valor real?
- 8a. De los resultados del ejercicio 7a, calcula la contribución rotacional a la entropía molar de vapor de agua a 25°C .
- 8b. De los resultados del ejercicio 7b, calcula la contribución rotacional a la entropía molar de dióxido de azufre a 25°C .
- 9a. Calcula la función de partición rotacional del CH_4 (a) por suma directa de los niveles de energía a 298K y 500K y (b) por aproximación de altas temperaturas. Toma $\bar{B}=5.2412\text{ cm}^{-1}$.
- 9b. Calcula la función de partición rotacional del CH_3CN (a) por suma directa de los niveles de energía a 298K y 500K y (b) por aproximación de altas temperaturas. Toma $\bar{A}=5.28\text{ cm}^{-1}$ y $\bar{B}=0.307\text{ cm}^{-1}$.

- 10a. La longitud de enlace del O_2 es 120.75 pm. Usa la aproximación de altas temperaturas para calcular la función de partición rotacional de la molécula a 300K.
- 10b. 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 .
- 11a. Una molécula de CO_2 es lineal, y sus números de onda vibracionales son 1388.2 cm^{-1} , 2349.2 cm^{-1} y 667.4 cm^{-1} , el último está doblemente degenerado y los otros no son degenerados. La constante rotacional de la molécula es 0.3902 cm^{-1} . Calcula las contribuciones rotacional y vibracional a la energía de Gibbs molar a 298K.
- 11b. Una molécula de O_3 es angular, y sus números de onda vibracionales son 1110 cm^{-1} , 705 cm^{-1} y 1042 cm^{-1} . Las constantes rotacionales de la molécula son 3.553 cm^{-1} , 0.4452 cm^{-1} y 0.3948 cm^{-1} . Calcula las contribuciones rotacional y vibracional a la energía de Gibbs molar a 298K.
- 12a. El estado basal del Cl es $^2P_{3/2}$ y un nivel $^2P_{1/2}$ cae 881 cm^{-1} arriba de éste. Calcular la función de partición electrónica de los átomos de Cl a (a) 500K y (b) 900K.
- 12b. El primer estado excitado del O_2 es $^1\Delta_g$ y cae 7918.1 cm^{-1} arriba del estado basal que es $^3\Sigma_g^-$. Calcular la función de partición electrónica de las moléculas de O_2 a (a) 500K y (b) 900K.
- 13a. Usa la información del ejercicio 12a para calcular la contribución electrónica a la capacidad calorífica de átomos de Cl a (a) 500K y (b) 900K.
- 13b. Usa la información del ejercicio 12b para calcular la contribución electrónica a la capacidad calorífica del O_2 a 400K.
- 14a. Usa la información del ejercicio 12a para calcular la contribución electrónica a la energía de Gibbs molar de átomos de Cl a (a) 500K y (b) 900K.
- 14b. Usa la información del ejercicio 12b para calcular la contribución electrónica a la energía de Gibbs molar del O_2 a 400K.
- 15a. Calcular la constante de equilibrio de la reacción $I_{2(g)} \rightleftharpoons 2I_{(g)}$ a 1000K de los siguientes datos del I_2 : $\bar{D} = 5.28\text{ cm}^{-1}$, $\bar{B} = 0.0373\text{ cm}^{-1}$ y $D_e = 1.5422\text{ eV}$. El estado basal de los átomos de yodo es $^2P_{3/2}$ lo que implica una degeneración de 4.
- 15b. Calcular la constante de equilibrio a 298K de la reacción de intercambio isotópico en fase gas $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br} \rightleftharpoons ^{79}\text{Br}^{79}\text{Br} + ^{81}\text{Br}^{81}\text{Br}$. La molécula de Br_2 tiene su estado basal no degenerado, sin otros estados electrónicos cercanos. Hacer el cálculo usando el número de onda vibracional del $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}$ igual a 323.33 cm^{-1} .