

Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2014

Guía 5: Gases moleculares

1. Las moléculas de un gas ideal diatómico tienen momento dipolar eléctrico μ_d . Muestre que la polarización eléctrica \mathbf{P} está dada por:

$$\mathbf{P} = \frac{N}{V} \mu_d \left[\coth \left(\frac{\mu_d \mathcal{E}}{kT} \right) - \frac{kT}{\mu_d \mathcal{E}} \right] \hat{n},$$

donde $\mathbf{E} = \mathcal{E} \hat{n}$ es el campo eléctrico externo. Pruebe que si $|\mu_d \mathcal{E}| \ll kT$, entonces la constante dieléctrica del gas vale

$$\epsilon = 1 + 4\pi \frac{N}{V} \frac{\mu_d^2}{3kT}.$$

Asumir que el campo eléctrico sobre cada molécula es simplemente \mathbf{E} . Usar que $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} = \epsilon \mathbf{E}$.

2. Estimar la temperatura por encima de la cual no están cuánticamente degenerados los siguientes gases:
- H_2 a una presión de 10^{-12} atm y a una presión de 1 atm.
 - ^{19}F y ^{238}U a 1 atm.
 - Un gas de electrones con $N/V = 1 \text{ \AA}^{-3}$ (densidades típicas de un sólido).
 - Un gas de electrones con $N/V = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (densidades típicas de un plasma).
3. La capacidad calorífica molar a volumen constante de un gas de moléculas poliatómicas no lineales es $12R$ para temperaturas lo suficientemente altas como para que los grados de libertad vibracionales estén saturados, pero no tanto como para que estén excitados los niveles electrónicos. Determinar el número de átomos de cada molécula.
4. Las frecuencias fundamentales de rotación y vibración de las moléculas de Cl_2 gaseoso son, respectivamente, $\nu_{10}^{\text{rot}} = 0.488 \text{ cm}^{-1}$ y $\nu^{\text{vib}} = 565 \text{ cm}^{-1}$. Un mol de este gas está a 298 K y 1 atm. Calcular:
- La función de partición de traslación.
 - La función de partición de rotación y el momento de inercia de las moléculas.
 - La función de partición de vibración.
 - La energía media.
 - La capacidad calorífica molar a volumen constante. Compare con el valor experimental de 6.15 cal/(mol K).
5. Calcule la entropía y la capacidad calorífica molar a presión constante para el monóxido de carbono (CO) a $T = 50 \text{ }^\circ\text{C}$ y $p = 1 \text{ atm}$, siendo la temperatura rotacional 2.765 K y la vibracional 3120 K. Tenga en cuenta que el espín nuclear es nulo para ambos núcleos.
6. Los números de onda de las tres vibraciones fundamentales del ozono (O_3) son 710 cm^{-1} , 1043 cm^{-1} y 1740 cm^{-1} . Su capacidad calorífica molar a presión constante aumenta desde 34.7 J/(mol K) a 200 K hasta 41.6 J/(mol K) a 400 K. A partir de estos datos deduzca si la molécula es lineal o angular.
7. (a) Un mol de H_2 está a 500 K y 1 atm. Calcule el valor de μ si $\nu_{10}^{\text{rot}} = 124 \text{ cm}^{-1}$ y $T_{\text{vib}} = 6210 \text{ K}$.
(b) Suponga una mezcla de un mol de H_2 con 5 moles de He a 500 K y 5 atm. Halle el volumen de la mezcla y el μ de cada gas, teniendo en cuenta que el espín nuclear del helio es nulo.