UNCUYO
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CUYO

FCEN FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
Naturaleza - Ciencia - Humanismo

PROGRAMA - AÑO 2018			
Espacio Curricular:	**Termodinámica Molecular**		
Carácter:	Obligatoria	**Período:**	2º Semestre
Carrera:	Licenciatura en Ciencias Básicas con orientación en Química		
Profesor Responsable:	Dra. Vanesa Galassi		
Equipo Docente:	Dr. Mario G. Del Pópolo		

Carga Horaria: 96 Hs

Requisitos de Cursado:

Correlativas aprobadas: Cálculo II y Física General III.
Correlativas regularizadas: Probabilidad y Estadística y Química Física.

1- EXPECTATIVAS DE LOGRO

- Interpretar procesos y cantidades termodinámicas en términos del comportamiento atómico o molecular. Proveer una interpretación molecular de las leyes de la termodinámica.
- Adquirir conocimientos básicos de química cuántica, espectroscopía, termodinámica estadística y de la teoría de las velocidades de reacción.
- Desarrollar habilidades y competencias en la resolución de situaciones problemáticas planteadas en los diferentes sistemas estudiados.

Utilizar herramientas computacionales para resolver problemas de química cuántica y termodinámica estadística.

2- DESCRIPTORES

Postulados de la mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger. Sistemas modelo: partícula en caja, oscilador armónico, rotor rígido. Principio variacional y teoría de perturbaciones. Estructura electrónica de átomos y moléculas. Modelo de electrones no interactuantes. Enlaces químicos y fuerzas interatómicas. Espectroscopía Molecular. Termodinámica estadística. Funciones de partición. Potenciales termodinámicos. Interpretación molecular de las leyes de la termodinámica. Ecuaciones de estado para sólidos, líquidos y gases. Equilibrio químico y funciones de partición. Teoría de las velocidades de reacción.

3- CONTENIDOS ANALITICOS (Defina los contenidaos de cada unidad, subdividiéndolos en temas, respetando los contenidos mínimos indicados en el plan de estudio correspondiente)

UNIDAD 1: MECÁNICA CUÁNTICA

Fundamentos y postulados de la mecánica cuántica. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Partícula en una caja unidimensional. Partícula en una caja tridimensional. Degeneración. Operadores. El oscilador armónico unidimensional. El rotor rígido de dos partículas. Métodos aproximados: método variacional y teoría de perturbaciones.

UNIDAD 2: ESTRUCTURA ELECTÓNICA DE ATOMOS Y MOLECULAS

Átomo de hidrógeno. Momento angular orbital. El spin del electrón. Átomo de helio y el principio de Pauli. Teoría de electrones independientes. Átomos multielectrónicos y tabla periódica. Enlaces químicos. La aproximación de Born-Oppenheimer. La molécula-ion de hidrógeno. Método de los Orbitales Moleculares (OM). Funciones de onda Hartree-Fock y de interacción de configuración.

UNIDAD 3: ESPECTROSCOPÍA MOLECULAR

Espectroscopía. Reglas de selección. Rotación y vibración de moléculas. Espectros rotacionales y vibracionales de moléculas diatómicas. Rotación y vibración de moléculas poliatómicas. Espectroscopía infrarroja, Raman, y electrónica.

UNIDAD 4: MECÁNICA ESTADÍSTICA

Macroestados y microestados. Ensambles estadísticos. Ensambles microcanónico y canónico. Distribución de velocidades en una dimensión. La distribución de Maxwell de rapidez molecular. Valores comparativos de la distribución de la rapidez: v_{med}, v_{mp}, y v_{ms}. Ley de distribución de Boltzmann. Función de partición. Función de partición molecular. Función de partición total. Función de partición traslacional. Función de partición rotacional. Función de partición vibracional. Función de partición electrónica.

UNIDAD 5: TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

Funciones de partición y cálculo de cantidades termodinámicas. Relación entre funciones de partición y potenciales termodinámicos. Interpretación estadística de la Primera y de la Segunda Ley de la Termodinámica. Cálculo de ecuaciones de estado para sólidos, líquidos y gases. Equilibrio químico en sistemas ideales.

UNIDAD 6: TEORÍA DE LAS VELOCIDADES DE REACCIÓN

Teoría de las colisiones. Frecuencia y requerimientos. Superficies de energía potencial. Teoría del estado de transición. Ecuación de Eyring. Aspectos termodinámicos. Dinámica de las colisiones moleculares. Transferencia de electrones en sistemas homogéneos.

4-BIBLIOGRAFÍA GENERAL

1. D. McQuarrie y J. D. Simon, "Physical Chemistry – A Molecular Approach", University Science Books, 1st Ed. (1997).

2. I. Levine, "Fisicoquímica", Ed. Mc Graw Hill Volumen I 5ta. Ed. (2004).
3. T. L. Hill, *"An introduction to statistical thermodynamics"*, Courier Corporation (1986).
4. M. W. Hanna, "Mecánica Cuántica para Químicos", Fondo Educativo Interamericano, (1985).

5-METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA Y EVALUACIÓN DURANTE EL CURSADO

El desarrollo de los temas se llevará a cabo a través de los siguientes recursos: (i) Exposición de contenidos conceptuales en clases teóricas, (ii) Resolución de problemas en clases prácticas de aula, (iii) Desarrollo de experiencias en clases prácticas de laboratorio de informática, (iv) Clases de consulta. La evaluación del aprendizaje se llevará a cabo a través de los informes de los trabajos prácticos computacionales, dos exámenes parciales, y/o un examen final integrador, según corresponda.

6- CONDICIONES DE REGULARIDAD TRAS EL CURSADO

Haber asistido y aprobado el 80% de los trabajos prácticos computacionales. Haber aprobado los dos exámenes parciales con una calificación mayor a 4 (cuatro).

7- SISTEMA DE APROBACIÓN Y/O PROMOCIÓN DEL ESPACIO

La promoción de la asignatura requerirá de la aprobación de los exámenes parciales con una calificación mayor o igual al 7 (siete) y del cumplimiento de las condiciones de regularidad. La calificación final será el promedio de las notas de los dos parciales.

Aquellos alumnos que acrediten regularidad en la asignatura estarán en condiciones de rendir un examen final para lograr la aprobación de la misma. El examen final escrito será integrador y estará basado en el programa de la materia, las guías de trabajos prácticos y la bibliografía.

Los alumnos que no cumplan con las condiciones establecidas en el punto 6, serán considerados alumnos no regulares. En tales casos el examen final tendrá dos instancias: un examen de laboratorio de informática que deberá ser aprobado para acceder a un examen final escrito integrador. La calificación final será la del examen escrito.

PROMOCIONABLE *(Marque con una cruz la respuesta correcta)*	*SI*	*X*	*NO*	

Dra. Vanesa Galassi
FIRMA Y ACLARACIÓN DEL RESPONSABLE DEL ESPACIO CURRICULAR

VºBº Altamirano, Jazelina C.