

<b>PROGRAMA – AÑO 2021</b>			
<b>1Espacio Curricular:</b>	<b>Termodinámica</b>		
<b>Carácter:</b>	<b>Obligatoria</b>	<b>Período:</b>	<b>2º semestre</b>
<b>Carrera/s:</b>	<b>Licenciatura en Química</b>		
<b>Profesor Responsable:</b>	<b>Dra. Vanesa V. Galassi</b>		
<b>Equipo Docente:</b>	<b>Dr. Mario G. Del Pópolo</b>		
<b>Carga Horaria:</b> 96 Hs. (40 hs. teóricos, 46 hs. prácticos y 10 hs. laboratorios computacionales)			
<b>Requisitos de Cursado:</b>	Correlativas aprobadas: M102 Cálculo II Correlativas regularizadas: M105 Probabilidad y Estadística Q204 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, y graficar expresiones funcionales.

### **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 ANALÍTICOS**

#### **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: ESPECTROSCOPIA 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. Ensamblados estadísticos. Ensamblados 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**

1. D. McQuarrie y J. D. Simon, "Physical Chemistry – A Molecular Approach" University Science Books, 1<sup>st</sup> Ed. (1997).
  2. Ira N. Levine "Physical Chemistry". Mc. Graw Hill, 6<sup>th</sup> Ed. (2009).
  3. Terrel L. Hill. "An Introduction to Statistical Thermodynamics". Addison-Wesley Series in Chemistry, 1<sup>st</sup> Ed. (1960).
- Bibliografía complementaria:**
4. D. McQuarrie y J. D. Simon, "Molecular Thermodynamics". University Science Books, 1<sup>st</sup> Ed. (1999).
  5. Peter Atkins, Julio De Paula, "Physical Chemistry". W.H. Freeman and Company, 9<sup>th</sup> Ed. (2010).

**5-METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA**

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- EVALUACIÓN DURANTE EL CURSADO Y CONDICIONES DE REGULARIDAD

Haber asistido y aprobado el 100% de los trabajos prácticos computacionales y clases de resolución de ejercicios, **incluyendo 4 actividades presenciales**. Haber aprobado los dos exámenes parciales con una calificación mayor a 4 (cuatro).

## 7- SISTEMA DE APROBACIÓN FINAL Y/O PROMOCIÓN DEL ESPACIO CURRICULAR

- 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 tendrá un 70 % de contribución del promedio de las notas de los dos parciales, y un 30 % de contribución de los informes de los trabajos prácticos computacionales.
- 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 LIBRES. 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.
- El sistema de calificaciones empleado se encuentra aprobado por Ord. N° 108/2010 CS – Art. 4:

Resultado	Escala Numérica Nota	Escala Porcentual %
No Aprobado	0	0 %
	1	1 a 12 %
	2	13 a 24 %
	3	25 a 35 %
	4	36 a 47 %
	5	48 a 59 %
Aprobado	6	60 a 64 %
	7	65 a 74 %
	8	75 a 84 %
	9	85 a 94 %
	10	95 a 100%

**PROMOCIONABLE** (Marque con una cruz la respuesta correcta)

SÍ

X

NO

8- CROMOGRAMA DE ACTIVIDADES				
S e m a n a	Fechas	Clases teóricas	Clases prácticas, de resolución de problemas y Laboratorios	Evaluaciones
		<i>Indicar fecha/día de la semana y nombre de la actividad</i>		
1	09/08 al 13/08	09/08 Mecánica Cuántica 11/08 Mecánica Cuántica		
2	16/08 al 20/08	18/08 Estructura Electrónica	16/08 1er Guía de Ejercicios: Mecánica Cuántica	
3	23/08 al 27/08	23/08 Estructura Electrónica 25/08 Estructura Electrónica		
4	30/08 al 03/09		30/08 2da Guía de Ejercicios: Estructura Electrónica 01/09 2da Guía de Ejercicios: Estructura Electrónica	
5	06/09 al 10/09	06/09 Espectroscopía 08/09 Espectroscopía		
6	13/09 al 17/09		13/09 3ra Guía de Ejercicios: Espectroscopía 15/09 1er Laboratorio de Informática: Mecánica Cuántica y Espectroscopía	
7	20/09 al 24/09		20/09 Consulta	22/09 Primer Examen Parcial
8	27/09 al 01/10	27/09 Mecánica Estadística 29/09 Mecánica Estadística		
9	04/10 al 08/10	06/10 Termodinámica Estadística	04/10 4ta Guía de Ejercicios: Mecánica Estadística	
10	11/10 al 15/10	11/10 Termodinámica Estadística 13/10 Termodinámica Estadística		
11	18/10 al 22/10		18/10 5ta Guía de Ejercicios:	

			Termodinámica Estadística 20/10 5ta Guía de Ejercicios: Termodinámica Estadística	
12	25/10 al 29/10	25/11 Teoría de las Velocidades de Reacción 27/11 Teoría de las Velocidades de Reacción		
13	01/11 al 05/11		01/11 6ta Guía de Ejercicios: Teoría de las Velocidades de Reacción  03/11 2do Laboratorio de Informática: Mecánica Estadística y Aplicaciones	
14	08/11 al 12/11		08/11 Consulta	10/11 Segundo Examen Parcial
15	15/11 Entrega de regularidades			15/11 Recuperatorio

**Fecha: 30/07/2021**

**Profesor Responsable: Vanesa V. Galassi**



**Firma:**