



UNIDAD: IZTAPALAPA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
NIVEL: LICENCIATURA		EN QUÍMICA	
CLAVE: 2141084	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: FISICOQUÍMICA V		TRIM: VI-IX
HORAS TEORÍA: 3	SERIACIÓN 2141083		CRÉDITOS: 7
HORAS PRÁCTICA: 1			OPT/OBL: OBL.

OBJETIVO(S):**GENERALES**

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Interpretar las propiedades macroscópicas de los sistemas en términos de sus parámetros moleculares.
- Establecer modelos microscópicos sencillos para estimar algunas propiedades termodinámicas, el equilibrio químico de gases ideales y la cinética de reacción.

ESPECÍFICOS

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Utilizar al colectivo canónico como un modelo de un sistema cerrado.
- Identificar la distribución de equilibrio de Maxwell-Boltzmann.
- Comprender la importancia que tiene la función de partición canónica Q y su relación con promedios estadísticos de propiedades termodinámicas.
- Obtener las contribuciones de Q para cada grado de libertad molecular en gases ideales.
- Determinar algunas propiedades termodinámicas, como la energía interna, la entalpía, la entropía, la energía libre, etc.
- Aplicar el concepto del potencial químico para obtener la constante de equilibrio de un sistema reactivo de gases ideales.
- Reconocer las aproximaciones presentes en la teoría del estado de transición y aplicarlo para estimar la velocidad de reacción de procesos elementales de gases ideales.
- Usar parámetros moleculares obtenidos con un programa de cálculos de estructura electrónica, reportados en la literatura, etc., para determinar Q en gases ideales.
- Describir el efecto que las fuerzas intermoleculares tienen sobre las propiedades termodinámicas de fluidos.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		2/3
CLAVE 2141084	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE FISICOQUÍMICA V	

CONTENIDO SINTÉTICO:

1. La distribución de Boltzman y el colectivo canónico.
2. La función de partición para un gas ideal de moléculas poliatómicas.
3. Probabilidad y promedios estadísticos.
4. Cálculo de las propiedades termodinámicas usando la función de partición.
5. El potencial químico y el equilibrio químico.
6. Estimación de la constante de velocidad con la teoría del estado de transición.

MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

- Clase de teoría en forma de conferencia magistral.
- Clase en forma de taller, individual o por equipo de alumnos.
- Al menos un seminario impartido por los alumnos (individual o por equipo) al final del trimestre.
Se recomienda que sean dos sesiones de 2 h por semana.
Se entenderá por taller una sesión en la que los alumnos resuelvan ejercicios dirigidos por el profesor, ésta se desarrollará en un laboratorio de cómputo.

MODALIDADES DE EVALUACIÓN:

Evaluación Global:

- Evaluaciones periódicas (al menos tres procurando que sean de carácter acumulativo o integrador).
 - Desempeño en el taller.
 - Evaluación del informe escrito y de la presentación oral.
 - Tareas periódicas (al menos tres).
- La ponderación de todas estas evaluaciones quedará a juicio del profesor.

Evaluación de Recuperación:

- El curso podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación y podrá ser global o complementaria a juicio del profesor.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		3/3
CLAVE 2141084	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE FISICOQUÍMICA V	

BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE:

Libro de texto:

1. Atkins, P. y De Paula, J., *Química Física*, 8ª Edición, Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008, Caps. 16, 17, 18, 24.

Libros de Consulta:

1. Laidler, K. J., Meiser, J.H, Sanctuary, B. C., *Physical Chemistry*, Houghton Mifflin, Boston, 2003, cap. 15.
2. Levine, I. N, *Physical Chemistry*, McGraw-Hill, New York, 1995, caps. 22, 23.
3. Ott, J.B., Boerio-Goates, J., *Chemical thermodynamics: principles and applications*, Elsevier, San Diego, 2000, cap. 10.

Libros para las Sesiones de taller:

1. Allen, M.P., Tildesley, D.J., *Computer Simulations of Liquids*, Oxford University Press, 2002.
2. Foresman. J.B., Frisch. A., *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, 2nd Ed. Gaussian, 1996.
3. *Manual de problemas y experimentos computacionales para el curso Fisicoquímica V.* en preparación