

UNIDAD	IZTAPALAPA	DIVISION	CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA	1 / 3
NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA				
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE		CRED.	7
2141084	FISICOQUIMICA V		TIPO	OBL.
H.TEOR. 3.0	SERIACION		TRIM. VI-IX	
H.PRAC. 1.0				

OBJETIVO(S):

Objetivos Generales:

Que al final de la UEA 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.

Objetivos Específicos:

Que al final de la UEA 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



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

CLAVE 2141084

FISICOQUIMICA V

Q en gases ideales.

- Describir el efecto que las fuerzas intermoleculares tienen sobre las propiedades termodinámicas de fluidos.

CONTENIDO SINTETICO:

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 CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

1. Clase de teoría en forma de conferencia magistral.
2. Clase en forma de taller, individual o por equipo de alumnos.
3. 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 EVALUACION:

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).



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA		3/ 3
CLAVE 2141084	FISICOQUIMICA V	

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.

BIBLIOGRAFIA 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



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]