



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Formato Base

Programa de Materia

NOMBRE DE LA MATERIA:

*Mecánica Estadística y
Cinética de Reacciones*

CÓDIGO DE LA MATERIA

QM 407

DEPARTAMENTO:

QUÍMICA

CARGA HORARIA:

TEORÍA: 80

PRÁCTICA: 0

TOTAL: 80

CRÉDITOS

11

TIPO DE CURSO

CURSO

NIVEL DE FORMACIÓN PROFESIONAL

LICENCIATURA

PRERREQUISITOS:

--

Mecánica Estadística y Cinética de Reacciones

1. Introducción

- 1.1 Mecánica clásica
- 1.2 Mecánica cuántica
- 1.3 Termodinámica

2. Mecánica estadística

- 2.1 Probabilidad termodinámica de un sistema
- 2.2 La distribución más probable
- 2.3 La función de partición
- 2.4 Sistemas de partículas independientes
- 3.5 La energía de un sistema
- 3.6 Separación de la función de partición

3. Gas ideal monoatómico

- 3.1 La función de partición de translación
- 3.2 La función de partición electrónica y nuclear
- 3.3 Las funciones termodinámicas en la translación

4. Gas ideal poliatómico

- 4.0 La aproximación del rotor rígido y el oscilador armónico
- 4.1 La función de partición de vibración
- 4.2 La función de partición de rotación
- 4.2 Las funciones de partición electrónicas y nucleares
- 4.3 Rotación
- 4.4 Vibración
- 4.5 La función de partición electrónica
- 4.6 Capacidades caloríficas de los gases

5. Equilibrio químico

- 5.1 La constante de equilibrio en términos de funciones de partición
- 5.2 Cálculo estadístico de las constantes de equilibrio
- 5.3 Entropía y probabilidad

6. Estadística de Boltzmann, Estadística de Fermi-Dirac y Estadística de Bose-Einstein

- 6.1 Estadística de Boltzmann
- 6.2 Estadística de Fermi-Dirac
- 6.3 Estadística de Bose Einstein

7. Teoría de colisiones

- 7.1 La constante de velocidad de reacción
- 7.2 Reacciones sin energía de activación
- 7.3 Reacciones en líquidos
- 7.4 Reacciones unimoleculares
- 7.5 Teoría de Lindemann

8. Teoría del complejo activado

- 8.1 Expresión termodinámica para la velocidad de reacción
- 8.2 Constante de velocidad para propiedades moleculares

9. Teoría de reacciones unimoleculares

- 9.1 El método RRKM
- 9.2 Las constantes de velocidad del método RRKM

Bibliografía:

"Fundamentos de Fisicoquímica"
Marón y Prutton Limusa Noriega
(1990)

"Fisicoquímica"
Farrington Daniels y Robert A. Alberty"
CECSA(1977)

"Physical Chemistry"
Vojtech Fried Hendrik F. Hamerka, Uldis Blukis
Macmillan Publishing Co., Inc. NY (1977)

"Thermodynamics and Statistical Mechanics
Aston y Fritz John Wiley & Sons Inc., NY (1959)

"Introduction to Statistical Mechanics"
T. H. Hill
Addison-Wesley Publishing Co. Reading, Mass. (1960)

"Statistical Mechanics" Donald A. McQuarrie
Harper & Row (1976)

Participantes :

Dr. Armando Castañeda Castañeda Dr. Norberto Casillas
Santana M. en C. Pedro Velázquez Ponce