



Cinvestav

QUÍMICA I

(60 horas = 6 créditos)

Contenido

1. Teoría cuántica de la materia (20 hrs)

- a. Partícula en una caja tridimensional-degeneración
- b. Oscilador armónico
- c. Rotor rígido con masa reducida
- d. Rotor libre

2. Termodinámica molecular (20 hrs)

- a. Funciones Termodinámicas (U, H, A, G, S) a partir de funciones de partición
- b. Funciones de partición: Sistema versus molecular
- c. Funciones de partición para un gas ideal
- d. Funciones termodinámicas de un gas ideal
- e. Condición de equilibrio y potencial químico
- f. Constante de equilibrio (clásica y estadística)

3. Teoría estadística de la materia (10 hrs)

- a. Funciones de partición molecular traslacional, vibracional y rotacional

4. Cinética molecular (10 hrs)

- a. Teoría del estado de transición

Bibliografía.

- McQuarrie D., Quantum Chemistry, University Science Books; 2nd edition, 2007.
- McQuarrie D., Simon J.D., Molecular Thermodynamics, University Science Books, Suasalito, California, 1999.
- McQuarrie D., Simon J.D., Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Suasalito, California, 1999.
- Berry R.S., Rice, S.A., Ross J., Physical Chemistry, 2nd Edition, John Wiley and Sons, New York, 2000.