

<b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>					1/4	
BAHIA BLANCA			ARGENTINA			
<b>DEPARTAMENTO DE QUÍMICA</b>						
PROGRAMA DE: FUERZAS INTERMOLECULARES Y TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA					CÓDIGO:	
					ÁREA NRO: IV	
					PROFESOR/A RESPONSABLE	
TEÓRICO			PRÁCTICAS			
Por semana	Por cuatrimestre		Por semana	Por cuatrimestre		
4	60		4	60		
Dra. Marisa Frechero						
A S I G N A T U R A S C O R R E L A T I V A S P R E C E D E N T E S						
A P R O B A D A S				C U R S A D A S		
CUÁNTICA PARA QUÍMICOS Y ESPECTROSCOPIA						
<b><u>DESCRIPCIÓN / OBJETIVOS</u></b>						
<p>En esta asignatura se transmiten al/la alumno/a los conceptos fundamentales de termodinámica estadística, interacciones de átomos e iones con una superficie y teorías de estabilidad coloidal fundamentales para el / la licenciado/a en química. Se complementan los conocimientos de termodinámica química clásica adquiridos en FISICOQUIMICA IA. Se analizan los fenómenos microscópicos en superficies e interfaces de aplicación en las determinaciones electródicas. Se incluyen los conceptos y técnicas experimentales básicas en el área de macromoléculas y coloides a fin de entender, cuantificar y controlar sistemas, fenómenos y técnicas químicas de especial relevancia tecnológica, por ejemplo: mezclas y disoluciones, sistemas coloidales, corrosión, conversión de energía electroquímica y el comportamiento de la interfase electrificada de los procesos electródicos. Aprender los conceptos y herramientas básicas de la termodinámica estadística y su aplicación para alcanzar la descripción de las fuerzas intermoleculares mediante la aplicación de potenciales empíricos y su aplicación en el cálculo de propiedades de sistemas interaccionantes. Establecer la reciprocidad entre las propiedades macroscópicas y la naturaleza de la descripción microscópica de los sistemas.</p> <p>Mediante técnicas de simulación computacional se espera dar una visión de los métodos el cálculo de propiedades de moléculas aisladas y fases condensadas. Para la modelización y simulación se manejarán tanto programas bajo licencia como de acceso libre.</p> <p>Un objetivo general, de vital importancia, es el de adquirir una concepción cuantitativa de la naturaleza de los fenómenos microscópicos en la Química para que el/la alumno/a valore el papel que la Fisicoquímica en el desempeño de la Química, no sólo como conjunto de conceptos, teorías y herramientas experimentales y de cálculo, capaces de explicar los objetos y fenómenos, sino como motor de los fundamentos de la ciencia, su desarrollo innovador y el diseño de nuevas tecnologías químicas. Además, de ejercitar el manejo de bibliografía y bases de datos accesibles a través de bibliotecas especializadas e Internet como pilares fundamentales en el diseño y ejecución de proyectos en el campo de la Química.</p>						
<b><u>PROGRAMA SINTÉTICO</u></b>						
<b>TEMA 1:</b> Fuerzas intermoleculares.						
<b>TEMA 2:</b> Interfase electrificada.						
<b>TEMA 3:</b> Estado coloidal.						
<b>TEMA 4:</b> Termodinámica estadística						
<b>TEMA5:</b> Calculo de propiedades termodinámicas a partir de las propiedades moleculares.						
<b>TEMA 6:</b> Fundamentos de la modelización molecular.						
VIGENCIA AÑOS	2022					

**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

PROGRAMA DE:

FUERZAS INTERMOLECULARES Y TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

CÓDIGO:

ÁREA NRO: IV

**PROGRAMA ANALÍTICO****TEMA 1:** Fuerzas intermoleculares.

Interacciones Coulómbicas. Interacciones multipolares, dipolo eléctrico. Interacciones de inducción y dispersión. Potenciales empíricos: esferas duras, pozo cuadrado, Lennard-Jones. Interacciones involucrando moléculas polares. Interacciones que involucran la polarización de las moléculas. Polarización de moléculas y átomos. Interacciones entre iones y moléculas. Unificación de interacciones de polarización. Efectos del solvente, polarizabilidad en exceso. Teoría general de Fuerzas de van der Waals. Ecuación de McLachlan. Efecto del medio. Solubilidad de iones en diferentes solventes.

**TEMA 2:** Interfase electrificada.

Interfaz electrodo-disolución. Modelos de doble capa: Helmholtz, Gouy-Chapman, Stern. Cinética electroquímica. Sobrepotencial. Electroodos polarizables y no polarizables. Estructura de la interfaz electrificada. Conversión de energía electroquímica. Fundamentos de los sensores electroanalíticos. Corrosión, pasivación y métodos de protección superficial. Ejemplos ilustrativos en electroforesis, tratamiento y análisis de aguas y sistemas acuosos, abastecimiento de agua potable y efluentes industriales

**TEMA 3:** Estado coloidal.

Naturaleza del estado coloidal. Micelas. Fuerzas de interacción entre partículas. Interacciones no-covalentes. Estabilidad coloidal. Determinación experimental de la concentración micelar crítica. Coloides de asociación. Estructuras autoorganizadas. Aplicaciones en nanociencia. Síntesis y caracterización de nanopartículas. Técnicas de caracterización microscópicas y técnicas de caracterización espectroscópica a sistemas coloidales.

**TEMA 4:** Termodinámica estadística.

Función de partición. Descripción mecanocuántica de un microestado, degeneración. Postulado de Boltzmann. Probabilidad canónica de un microestado. Función de partición canónica. Relación entre energía Gibbs y función de partición canónica. Ejemplos de funciones de partición sencillas.

**TEMA 5:** Calculo de propiedades termodinámicas a partir de las propiedades moleculares.

Sistemas no interaccionantes. Función de partición molecular: caso de partículas distinguibles e indistinguibles. Gas monoatómico y gas diatómico. Energía, entropía y calor específico. Principio de equipartición. Mezclas de gases, función de partición multicomponente. Entropía de mezcla. Equilibrio químico. Constantes de equilibrio. Gases reales. Función de partición configuracional. Segundo coeficiente de virial. Ecuación de van der Waals. Cristales monoatómicos. Función de partición. Modelo de Einstein. Modelo de Debye. Defectos puntuales en cristales. Calor específico. Fluidos clásicos. Función de Distribución radial y cálculo de magnitudes termodinámicas. Disoluciones. Teoría de Debey-Hückel.

**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

PROGRAMA DE:

CÓDIGO:

FUERZAS INTERMOLECULARES Y TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

ÁREA NRO: IV

**TEMA 6:** Fundamentos de la modelización molecular.

Conocer el fundamento de los métodos de simulación por dinámica molecular. Aplicación de los conceptos de termodinámica estadística a diferentes sistemas moleculares y fases condensadas. Simulación de dinámica molecular para calcular propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas de sistemas moleculares simples.

**PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS**

Se desarrollarán en grupos reducidos una serie de prácticas de laboratorio, tanto de carácter experimental como de cálculo y de utilización de herramientas teóricas y de simulación computacional, siendo la asistencia a todas las sesiones de prácticas obligatoria. Se valorará la obtención por el alumno de habilidades teórico-prácticas, así como la destreza en la utilización de los equipos experimentales y en el manejo de paquetes informáticos de tratamiento de datos. De las prácticas se deberá realizar un informe científico individual.

Laboratorio 1: Tema 2. Interfase electrificada.

Laboratorio 2: Tema 3. Estabilidad coloidal. Potencial Zeta.

Laboratorio 3: Tema 5. Propiedades termodinámicas a partir de las propiedades moleculares.

Laboratorio 4: Tema 6. Simulación de dinámica molecular y cálculo de propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas

**METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA**

Se adopta una metodología mixta de aprendizaje colaborativo y autoaprendizaje, mediante clases de teoría, seminarios y clases de debate programadas. Las actividades de ejercitación y profundización tanto como las de adquisición de competencias están programadas para potenciar el trabajo autónomo (presentación de trabajos), el trabajo colaborativo (prácticas de laboratorio) y el trabajo formativo (clases de teoría y debate). Durante las clases teóricas se brindará el contenido fundamental orientativo que se encontrará a disposición de los/las alumnos/as en el sistema Moodle así como también material de texto y audiovisual de soporte necesarios para su comprensión.

Para los seminarios se propondrán temas para profundizar conceptos, aplicaciones relevantes relacionadas a los contenidos desarrollados y ejercitación para resolver o discutir grupalmente de modo de analizar tanto los resultados obtenidos como su significado. Los contenidos de la asignatura se presentarán haciendo especial énfasis en relacionar los aspectos estudiados con otras disciplinas y los fenómenos fisicoquímicos de la vida diaria, así como en su carácter multidisciplinar, para ampliar sus conocimientos y desarrollar habilidades sobre temas transversales que le permitan despertar el interés en otros aspectos del ejercicio de la profesión.

Para potenciar el trabajo en grupo la presentación y debate de los trabajos propios y ajenos, le permitirá que poner en práctica habilidades en la obtención de información, en la utilización crítica de información bibliográfica y bases de datos y en la revisión entre pares llevando a desarrollar el sentido crítico y autocrítico.

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

PROGRAMA DE:

FUERZAS INTERMOLECULARES Y TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

CÓDIGO:

ÁREA NRO: IV

**FORMA DE EVALUACIÓN**

El rendimiento académico y la calificación final de la asignatura se determinará de forma ponderada según las proporciones detalladas a continuación:

Trabajo experimental de laboratorio, 20%.

Resolución de actividades prácticas de ejercitación y profundización, 20%.

Examen final escrito (previa aprobación de los laboratorios y actividades), 60%.

Se espera que esta modalidad permita al alumno/a adaptar su tiempo de aprendizaje mediante la construcción significativa de los elementos que conforman la asignatura.

**BIBLIOGRAFÍA:**

Israelachvili, J.N., Intermolecular and Surface Forces, 3°ed. Academic Press, London, 1985.

McQuarrie, D. A.; Simon, J. D.: Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Book, 1997.

M.P.Allen and D.J.Tildesley, Computer simulations of liquids, Oxford Science Publications. Oxford. 1987.

Atkins, P. y de Paula, J.: Química Física, 8ª Edición, Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008.

Levine, I. N.: Fisicoquímica, 5ª ed., McGraw-Hill/Interamericana de España, Madrid, 2004.

Levine, I.N., Principios de Fisicoquímica, 6ª Edición, McGraw Hill/Interamericana, México, 2014.

Rache, J.M., Introducción a la termodinámica estadística: fotones y fonones. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia 2014.

T.L. Hill, An Introduction to Statistical Thermodynamic", Dover Publications, New York. 1986.

T.J.H. Vlugt, J.P.J.M. van der Eerden, M. Dijkstra, B. Smit, D. Frenkel, Introduction to Molecular Simulation and Statistical Thermodynamics, <http://www.phys.uu.nl/~vlugt/imsst> ISBN: 978-90-9024432-7 Delft, The Netherlands, 2008

F. W. Sears, G.L. Salinger, Termodinámica, teoría cinética y termodinámica estadística, Editorial Reverté, 1978.

Material específico provisto por la cátedra.

AÑO	PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada)		
2022	Prof. Marisa A. Frechero		
V I S A D O			
COORDINADOR/A DE AREA	SECRETARIO/A ACADÉMICO/A	DIRECTOR/A DECANO/A	
FECHA:	FECHA:	FECHA:	