



## Cálculo de propiedades termodinámicas como función de la temperatura

Eugenia Dzib-Reyes<sup>1</sup>, José Luis Cabellos<sup>1</sup>, Alba Vargas-Caamal<sup>1</sup>, Filiberto Ortiz-Chi<sup>2</sup> y Gabriel Merino<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y Estudios Avanzados, Unidad Mérida, Km. 6 Antigua carretera a Progreso Apdo. Postal 73, Cordemex, 97310, Mérida, Yuc., México.

<sup>2</sup>Cátedra CONACYT, División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, C.P. 86690, Cunduacán, Tabasco, México.

e-mail: edzib@cinvestav.mx, gmerino@cinvestav.mx

Las funciones termodinámicas de los gases ideales tales como la entropía, la capacidad calorífica y la entalpía pueden ser calculadas fácilmente a partir de la función de partición molecular. La información necesaria para el determinar las propiedades termodinámicas se incluye en el archivo de salida para cálculos de frecuencias vibracionales realizado por cualquier programa de estructura electrónica disponible. En este trabajo se presenta un programa escrito en *Python* para el cálculo de funciones termodinámicas a diferentes temperaturas, por medio de la función de partición canónica, usando la aproximación del rotor rígido-oscilador armónico<sup>1</sup> debido a que es simple y adecuada.

[1] Irikura, KK. In *Computational thermochemistry: Prediction and Estimation of Molecular Thermodynamics*, 212th National Meeting of the American Chemical Society, Orlando, FL, Aug 25–29, 1996; Irikura, KK., Frurip., Eds.; American Chemical Society: Washington, DC, 1998.