

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA
ESCUELA DE QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE FISICOQUÍMICA

FISICOQUÍMICA III (Código 71322)

I. INFORMACIÓN GENERAL

- | | |
|---|--|
| 1.1 Docente: Dr. César Antonio Estrada Mendizábal | 1.6 Duración del curso: un semestre |
| 1.2 Auxiliar: | 1.7 Docencia directa: 3 períodos/semana |
| 1.3 Ciclo o fase: 7°. | 1.8 Nivel: fundamental |
| 1.4 Fecha: enero 2014 | 1.9 Lugar: salón 301, edificio T-11 |
| 1.5 Horarios: miércoles de 13:45 a 14:45 | 1.10 Requisito: Fisicoquímica II (61323) |
| Jueves y viernes de 18:00 a 19:00 | |
| Laboratorio: miércoles de 16:00 a 19:00 | |

II. DESCRIPCIÓN (por unidades, módulos o secciones)

En este curso se presentan los conceptos básicos de la mecánica cuántica y la mecánica estadística. Se cubren diferentes casos de la ecuación de Schrodinger, la estructura electrónica atómica y molecular y, en mecánica estadística, el concepto de “ensambles”, la función de partición y su relación con la termodinámica y la distribución de Boltzmann. Se hace una introducción a la Química cuántica computacional.

III. OBJETIVOS GENERALES

Lograr que el estudiante al final del curso esté en capacidad de:

3.1 Nivel cognoscitivo

- 3.1.1 Conocer los postulados básicos de la mecánica cuántica y sus consecuencias, las propiedades de la ecuación de Schrodinger, la definición de operador y algunos sistemas cuánticos sencillos como el oscilador armónico y el rotor rígido.
- 3.1.2 Saber la naturaleza cuántica del átomo de hidrógeno, de los átomos polielectrónicos y de la estructura electrónica molecular.
- 3.1.3 Conocer los conceptos básicos de la mecánica estadística y su relación con la termodinámica.

3.2 Nivel Psicomotriz

- 3.2.1 Analizar y resolver problemas básicos de mecánica cuántica y mecánica estadística que estén relacionados con el contenido del curso.
- 3.2.2 Iniciarse en el uso del programa Spartan para realizar cálculos cuánticos.
- 3.2.3 Se promoverá la apreciación cuántica y mecánico-estadística de los fenómenos químicos.

3.3 Nivel afectivo

- 3.3.1 Apreciar la relevancia de la mecánica cuántica y la mecánica estadística en la química.

IV. CONTENIDOS PROGRAMÁTICOS

| | |
|--|--|
| 1. Conceptos básicos | 2. La estructura electrónica de los átomos. |
| 1.1 Introducción: Relación de la teoría cuántica con la Química. Ejemplos de cálculos cuánticos. | 2.1 La solución cuántica del problema del átomo de hidrógeno. Las funciones de onda reales. Orbitales. |
| 1.2 La ecuación de Schrodinger y la función de onda. Dependencia o independencia del tiempo. | 2.2 El espín del electrón y el principio de Pauli. 2.3 Los átomos polielectrónicos, el principio de |

| | |
|--|---|
| <p>1.3 Sistemas de varias dimensiones y separación de variables.</p> <p>1.4 Los operadores y su relación con la mecánica cuántica.</p> <p>1.5 Los postulados de la mecánica cuántica. Conjuntos de base.</p> | <p>construcción y la tabla periódica.</p> <p>2.4 Las funciones de onda de Hartree-Fock y de interacción de configuraciones.</p> |
| <p>3. La estructura electrónica molecular:</p> <p>3.1 El enlace químico</p> <p>3.2 La aproximación de Born-Openheimer</p> <p>3.3 La molécula H_2^+</p> <p>3.4 El método de orbitales moleculares</p> <p>3.5 Cálculo de propiedades moleculares</p> <p>3.6 Métodos semiempíricos</p> <p>3.7 El método de enlace de valencia</p> <p>3.8 Cálculos cuánticos con el programa Spartan.</p> | <p>4. Mecánica estadística</p> <p>4.1 Introducción. El concepto de ensamble. La función de partición.</p> <p>4.2 Partículas independientes. Los gases ideales y su función de partición.</p> <p>4.3 La ley de distribución de Boltzmann</p> <p>4.4 Termodinámica estadística de los gases ideales</p> <p>4.5 Propiedades termodinámicas y constantes de equilibrio de gases ideales</p> <p>4.6 La entropía y la tercera ley de la termodinámica</p> <p>4.7 Mecánica estadística de fluidos.</p> |

PROGRAMACIÓN ESPECÍFICA

| OBJETIVO ESPECÍFICO | CONTENIDO TEMÁTICO | METODOLOGÍA | PERÍODO | CALENDARIZACIÓN |
|---|--|---|----------|---|
| <p>Que el estudiante:</p> <p>1. Adquiera los conceptos básicos de la mecánica cuántica.</p> | <p>Los conceptos cuánticos básicos</p> | <p>Clase magistral, participación de los estudiantes y resolución de problemas.</p> | <p>6</p> | <p>Del 21 de enero al 12 de febrero</p> |

| | | | | |
|---|---|--|----|---------------------------------|
| 2. Conozca el punto de vista cuántico de la estructura electrónica de los átomos. | La estructura electrónica de los átomos | Clase magistral, participación de los estudiantes y resolución de problemas. | 12 | Del 14 de febrero al 5 de marzo |
| 3. Se inicie en el estudio de la estructura electrónica molecular. | La estructura electrónica molecular | Clase magistral, participación de los estudiantes y resolución de problemas | 12 | Del 24 de marzo al 11 de abril |
| 4. Se inicie en el estudio de la mecánica estadística y vea su relación con la química. | Mecánica estadística | Clase magistral, participación de los estudiantes y resolución de problemas. | 20 | Del 14 de abril al 5 de mayo |

V. EVALUACIÓN

- 5.1 Evaluación escrita: se harán tres exámenes parciales (en las fechas fijadas por el CEDE) y exámenes cortos.
- 5.2 Organización de la zona:
- | | |
|---|------------------|
| Tres exámenes parciales (del mismo valor) | 57 puntos |
| Exámenes cortos y tareas | 18 puntos |
| ZONA..... | 75 puntos |
| Examen final | <u>25 puntos</u> |
| <u>NOTA FINAL</u> | 100 puntos |

VII. RECURSOS DIDÁTICOS

- 7.1 Presentación de los contenidos del curso por el profesor.
- 7.2 El estudiante estudiará los contenidos antes y después de las clases.
- 7.3 Resolución de problemas con la participación de los estudiantes.
- 7.4 Prácticas del uso de Gaussian.

VI. BIBLIOGRAFÍA

- 8.1 Texto: Levine, I., **“Fisicoquímica”**, 4ª. Ed., Vol 2, McGraw/Hill, Madrid, 1996.
- 8.2 Atkins, P.W., **“Fisicoquímica”**, Fondo Educativo Interamericano, S.A., México, 1985.
- 8.3 Castellán, G.W. **“Fisicoquímica”**, 2ª. Edición, Addison Wesley Longman, México, 1998.

XI. CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

| TIEMPO ACTIVIDAD, TEMA O UNIDADES DE TRABAJO | 1 MES ENERO | | | | 2 MES FEBRERO | | | | 3 MES MARZO | | | | 4 MES ABRIL | | | | 5 MES MAYO | | | |
|--|-------------------|--|---|---|---------------------|---|---|---|-------------------|--|--|--|-------------------|--|---|---|------------------|---|--|--|
| | SEMANA | | | | SEMANA | | | | SEMANA | | | | SEMANA | | | | SEMANA | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 1. Conceptos cuánticos básicos | | | X | X | X | X | | | | | | | | | | | | | | |
| 2. La estructura electrónica de los átomos. | | | | | | | X | X | X | | | | | | X | X | | | | |
| 3. Estructura electrónica molecular | | | | | | | | | | | | | | | | X | | | | |
| 4. Mecánica estadística | | | | | | | | | | | | | | | | | X | X | | |

CAEM/ybdeo.