

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: 7º. | 1.8 Nivel: fundamental |
| 1.4 Fecha: enero 2015 | 1.9 Lugar: salón 301, edificio T-11 |
| 1.5 Horarios: miércoles de 13:45 a 14:45
Jueves y viernes de 18:00 a 19:00
Laboratorio: miércoles de 16:00 a 19:00 | 1.10 Requisito: Fisicoquímica II (61323) |

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 |
| Laboratorio, 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/yb.