UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA

ESCUELA DE QUÍMICA

DEPARTAMENTO DE FISICOQUÍMICA

**FISICOQUÍMICA III (Código 71322)**

1. **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 2017 1.9 Lugar: salón 301, edificio T-11

y salón 03, edificio S-13

1.5 Horarios: Jueves de 18:00 a 20:00 1.10 Requisito: Fisicoquímica II (61323)

Viernes de 18:00 a 19:00

**Laboratorio**: martes de 16:00 a 20:00

1. **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.

1. **OBJETIVOS GENERALES**

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

* 1. **Nivel cognoscitivo**
     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.
     2. Saber la naturaleza cuántica del átomo de hidrógeno, de los átomos polielectrónicos y de la estructura electrónica molecular.
     3. Conocer los conceptos básicos de la mecánica estadística y su relación con la termodinámica.
  2. **Nivel Psicomotriz**
     1. Analizar y resolver problemas básicos de mecánica cuántica y mecánica estadística que estén relacionados con el contenido del curso.
     2. Iniciarse en el uso del programa Spartan para realizar cálculos cuánticos.
     3. Se promoverá la apreciación cuántica y mecánico-estadística de los fenómenos químicos.
  3. **Nivel afectivo**
     1. Apreciar la relevancia de la mecánica cuántica y la mecánica estadística en la química.

1. **CONTENIDOS PROGRAMÁTICOS**

|  |  |
| --- | --- |
| 1. Conceptos básicos    1. Introducción: Relación de la teoría cuántica con la Química. Ejemplos de cálculos cuánticos.    2. La ecuación de Schrodinger y la función de onda. Dependencia o independencia del tiempo.    3. Sistemas de varias dimensiones y separación de variables.    4. Los operadores y su relación con la mecánica cuántica.    5. Los postulados de la mecánica cuántica. Conjuntos de base. | 1. La estructura electrónica de los átomos.    1. La solución cuántica del problema del átomo de hidrógeno. Las funciones de onda reales. Orbitales.    2. El espín del electrón y el principio de Pauli.    3. Los átomos polielectrónicos, el principio de construcción y la tabla periódica.    4. Las funciones de onda de Hartree-Fock y de interacción de configuraciones. |
| 1. La estructura electrónica molecular:    1. El enlace químico    2. La aproximación de Born-Openheimer    3. La molécula H2+    4. El método de orbitales moleculares    5. Cálculo de propiedades moleculares    6. Métodos semiempíricos    7. El método de enlace de valencia    8. Cálculos cuánticos con el programa Spartan. | 1. Mecánica estadística    1. Introducción. El concepto de ensamble. La función de partición.    2. Partículas independientes. Los gases ideales y su función de partición.    3. La ley de distribución de Boltzmann    4. Termodinámica estadística de los gases ideales    5. Propiedades termodinámicas y constantes de equilibrio de gases ideales    6. La entropía y la tercera ley de la termodinámica    7. Mecánica estadística de fluidos. |

**PROGRAMACIÓN ESPECÍFICA**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| OBJETIVO ESPECÍFICO | CONTENIDO TEMÁTICO | METODOLOGÍA | PERÍODO | CALENDARIZACIÓN |
| Que el estudiante:   1. Adquiera los conceptos básicos de la mecánica cuántica. | Los conceptos cuánticos básicos | Clase magistral, participación de los estudiantes y resolución de problemas. | 6 | Del 23 de enero al 12 de febrero |
| 1. 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 |
| 1. 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 |
| 1. 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 |

1. **EVALUACIÓN**
   1. Evaluación escrita: se harán tres exámenes parciales (en las fechas fijadas por el CEDE) y exámenes cortos.
   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 ................................................................................... 25 puntos

NOTA FINAL................................................................................... 100 puntos

**VII. RECURSOS DIDÁTICOS**

* 1. Presentación de los contenidos del curso por el profesor.
  2. El estudiante estudiará los contenidos antes y después de las clases.
  3. Resolución de problemas con la participación de los estudiantes.
  4. Prácticas del uso de Gaussian.

1. **BIBLIOGRAFÍA**
   1. Texto: Levine, I., **“Fisicoquímica”**, 4ª. Ed., Vol 2, McGraw/Hill, Madrid, 1996.
   2. Atkins, P.W., **“Fisicoquímica”**, Fondo Educativo Interamericano, S.A., México, 1985.
   3. Castellán, G.W. **“Fisicoquímica”**, 2ª. Edición, Addison Wesley Longman, México, 1998.
2. **CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **TIEMPO**  **ACTIVIDAD, TEMA**  **O UNIDADES DE TRABAJO** | **1**  **MES**  **ENERO** | | | | **2**  **MES**  **FEBRERO** | | | | **3**  **MES**  **MARZO** | | | | | **4**  **MES**  **ABRIL** | | | | **5**  **MES**  **MAY0** | | | |
| **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** |  |  |  |  |  |  |
| 1. Estructura electrónica molecular |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | **X** |  |  |  |  |  |
| 1. Mecánica estadística |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | **X** | **X** |  |  |  |

**CAEM/yb.**