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.**