

Fisicoquímica IV (2141083)

Andrés Cedillo (AT-250)

Objetivos

Que, al finalizar el curso, el alumno:

- Comprenda y explique los fundamentos de la mecánica cuántica.
- Aplique los métodos de la mecánica cuántica en algunos sistemas de interés en química.

Temario

- 1. Fundamentos de la mecánica cuántica (cap. 8)**
 - antecedentes
 - principios básicos
- 2. Aplicaciones sencillas (cap. 9)**
 - movimientos de traslación, rotación y vibración
 - teoría de perturbaciones
- 3. Estructura electrónica de los átomos (cap.10)**
 - átomos hidrogenoides
 - espín electrónico y el principio de exclusión
 - átomos polieletrónicos
- 4. Estructura molecular (cap. 11)**
 - método variacional
 - orbitales moleculares
 - métodos de la química computacional

Bibliografía

Textos

- (1) **Atkins, PW, de Paula, J**
Química Física
Panamericana (2008), caps 8-11
- (2) **Cedillo, A**
Curso de Química Cuántica
www.fqt.izt.uam.mx/cedillo

Consulta

- (A) **Levine, IN**
Fisicoquímica
6a ed, McGraw-Hill (2013)
- (B) **McQuarrie, DA, Simon, JD**
Physical Chemistry: A Molecular Approach
University Science Books (1997)
- (C) **Woodbury, G**
Physical Chemistry
Brooks/Cole (1996)
- (D) **Dykstra, CE**
Physical Chemistry: A Modern Introduction
Prentice (1997)
- (E) **Ball, DW**
Physical Chemistry
2nd ed. Cengage (2015)

Antecedentes necesarios

Los alumnos necesitan los conceptos básicos del cálculo diferencial e integral de una y varias variables, del álgebra lineal y de las ecuaciones diferenciales. Todos estos temas se cubren en los cursos de matemáticas de la licenciatura. En la página del curso en Google Classroom hay una colección de ejercicios de práctica de algunos de los conceptos señalados previamente.

Evaluación

4 exámenes parciales, uno por cada tema, y serán acumulativos

Exámenes parciales: duración de 60 minutos.

Tareas: Los problemas de tarea se discutirán al inicio de la sesión siguiente.

Escala de calificaciones

MB: 87-100 B: 74-86S: 60-73 NA: 0-59

Trimestre 21-O, grupo CG-01

Sesiones teóricas:	Ma, Ju	10:00-11:30	Google Classroom
Sesiones prácticas:	Ma, Ju	11:30-12:00	Google Classroom
Asesoría:	Ma, Ju	11:30-12:00	Google Classroom

Modalidades de conducción

La plataforma del curso

El material digital del curso está almacenado en la plataforma *Google Classroom* y está disponible para todos los alumnos inscritos en el curso. En este sitio se dará inicio a todas las sesiones programadas. La liga para cada sesión estará disponible en esta página. Las sesiones de clase se llevarán a cabo por medio de *Google Meets*.

La planeación del curso: objetivos, temario, bibliografía y forma de evaluación está disponible en la plataforma.

La forma de trabajo en cada sesión

Para las sesiones de cada semana (martes y jueves de 10 a 12 horas) habrá una lista de actividades. Algunas actividades se deben realizar antes de la sesión, principalmente lecturas (de los libros de texto) y resolución de ejercicios (de los libros de texto). Durante cada sesión habrá otras actividades, normalmente, la discusión de los temas y las actividades del taller. El material para las sesiones del taller está disponible en la plataforma del curso. Todas las sesiones se realizarán en la plataforma del curso.

El trabajo en casa

Adicionalmente, a los ejemplos y ejercicios de las sesiones, los alumnos deben resolver más problemas. El material del taller y los libros de texto contienen colecciones de problemas. Es necesario que todos los alumnos resuelvan tantos ejercicios como sea necesario para alcanzar el dominio de cada tema.

La experiencia en este curso indica que la resolución de problemas y ejercicios adicionales a los de la clase facilitan la asimilación y el dominio de los temas que se desarrollan a lo largo del curso.

Como en todos los cursos de nuestra institución, cada alumno debe dedicar una hora de trabajo en casa por cada hora de clase. Por esta razón, se espera que dediquen cuatro horas a la semana de trabajo en casa para este curso.

Los exámenes en clase

Los cuatro exámenes que se harán en este curso durante la sesión de clase se entregarán en la plataforma. Se debe subir el archivo del examen con los datos del alumno y adjuntar una foto del procedimiento de solución de cada ejercicio y las respuestas correspondientes.

Cada alumno resolverá los problemas en su cuaderno y escribirá las respuestas en un recuadro.

Para cada problema, tomará una foto del procedimiento y lo añadirá al documento del examen en el lugar indicado. Ya con las imágenes insertadas, enviará el documento del examen en la plataforma en el formato de *Google Docs*, a la hora especificada con antelación. Las fotos de cada solución deben ser legibles e incluir los procedimientos. Las imágenes pueden provenir de la cámara del teléfono o de un *scanner*.

Planeación de las actividades

Semana 1 (nov. 9, 11)

Ejercicios de práctica

Tema 1 (cap. 8 del libro de Atkins, caps. 1-2 del texto 2)

Semana 2 (nov. 16, 18)

Tema 1 (cap. 8 del libro de Atkins, caps 2-3 del texto 2)

Semana 3 (nov. 23, 26)

Tema 2 (cap. 8 del libro de Atkins, cap. 4 del texto 2)

Semana 4 (nov. 30, dic. 2)

Primer examen parcial

Tema 2 (cap. 9 del libro de Atkins, cap. 5 del texto 2)

Semana 5 (dic. 7, 9)

Tema 2 (cap. 9 del libro de Atkins, cap. 6 del texto 2)

Semana 6 (dic. 14, 16)

Tema 3 (cap. 10 del libro de Atkins, caps. 10, 7 del texto 2)

Semana 7 (ene. 4, 6)

Segundo examen parcial

Tema 3 (cap. 10 del libro de Atkins, caps. 7, 8 del texto 2)

Semana 8 (ene. 11, 13)

Tema 3 (cap. 10 del libro de Atkins, caps. 8, 12 del texto 2)

Semana 9 (ene. 18, 20)

Tema 4 (cap. 11 del libro de Atkins, cap. 12 del texto 2)

Semana 10 (ene. 25, 27)

Tercer examen parcial

Tema 4 (cap. 12 del libro de Atkins, caps. 12, 13 del texto 2)

Semana 11 (feb. 1, 3)

Tema 4 (cap. 12 del libro de Atkins, cap. 13 del texto 2)

Semana 12

Cuarto examen parcial