

PRONTUARIO

TÍTULO:	Química física I
CODIFICACIÓN:	QUI 401
PRERREQUISITOS:	QUI 202 y FIS 203
CORREQUISITO:	QUI 401L
CRÉDITOS:	4 créditos 45 horas contacto 45 horas de laboratorio 1 término

DESCRIPCIÓN

Curso de Química Física desarrollado en forma teórica y experimental donde se utiliza la metodología activa de aprendizaje para que los estudiantes de química adquieran los conocimientos relacionados a la mecánica cuántica y solución de problemas simples. También se discuten temas como: partícula en la caja, oscilador armónico simple, rotor rígido y átomo de hidrógeno; métodos de aproximación, teorema de variación y teoría de perturbación; sistemas de átomos polielectrónicos y moléculas simples; principios de espectroscopía molecular y atómica; teoría cinética de gases y principios fundamentales de la cinética de las reacciones químicas.

JUSTIFICACIÓN

En los cursos introductorios e intermedios de química el o la estudiante aprende y utiliza una serie de propiedades que son un producto de dichas leyes. El curso de química física ofrece el fundamento físico y matemático de estas leyes y cómo de ellas se derivan las propiedades de la materia que explican y predicen su comportamiento. Sólo un conocimiento a este nivel permite la transformación consciente de la materia para el beneficio del ser humano. Este es, en último análisis, el propósito del conocimiento científico. Este curso permite al estudiante de química aplicar estos conocimientos en su desarrollo profesional ya sea en la industria química como en la investigación científica.

COMPETENCIAS

El curso desarrolla en el o la estudiante las siguientes competencias:

- **Cuestionamiento crítico**
- **Investigación y exploración**

OBJETIVOS

Al finalizar el curso el o la estudiante será capaz de:

1. Explicar las funciones de estado de la partícula en la caja, del oscilador armónico, del rotor rígido y del átomo hidrogénico aplicando la ecuación de Schrödinger.
2. Aplicar el método de variación y el método de perturbación.
3. Aproximar funciones de onda de átomos superiores utilizando el determinante de Slater.
4. Utilizar orbitales atómicos para generar orbitales moleculares de moléculas simples.
5. Conocer los fundamentos de la espectroscopía de moléculas diatómicas.
6. Explicar la teoría cinética de gases.
7. Aplicar las formas integradas de reacciones con leyes de rapidez de órdenes diversos.
8. Generar leyes de rapidez a partir de mecanismos de reacción usando la aproximación de paso lento y la del estado estacionario.

CONTENIDO

- I. Mecánica cuántica
 - A. Desarrollo histórico
 - B. Fundamento de la mecánica cuántica
 1. Ecuación de Schrödinger
 2. Postulados de la mecánica cuántica
 - C. Aplicaciones sencillas
 1. Partícula libre
 2. Partícula en la caja
 3. Oscilador armónico simple
 4. Rotor rígido
 - D. Momentum angular
 - E. Átomo hidrogénico

- F. Métodos de aproximación
 - 1. Método de variación
 - 2. Teoría de perturbación
 - G. Átomos polielectrónicos
 - 1. Funciones de espín y principio de exclusión de Pauli
 - 2. Determinantes de Slater
 - H. Moléculas diatómicas
 - 1. H_2^+ y H_2
 - 2. Combinaciones lineales de orbitales atómicos (LCAO)
- II. Espectroscopía atómica y molecular
- A. Estados electrónicos y reglas de selección
 - B. Espectroscopía vibracional y rotacional
- III. Cinética química
- A. Teoría cinética de gases
 - B. Cinética de reacciones en fase gaseosa
 - 1. Forma integrada de Ley de rapidez
 - 2. Mecanismos
 - 3. Dependencia con temperatura
 - C. Cinética de reacciones en solución
 - D. Catálisis heterogénea

EXPERIENCIAS DE LABORATORIO

- A. Teoría de Bohr
- B. Partícula en una caja de potencial
- C. Oscilador armónico
- D. Rotor rígido
- E. Orbitales atómicos y moleculares
- F. Espectroscopia molecular
- G. Análisis de datos cinéticos
- H. Dependencia de la temperatura en las constantes de velocidad

METODOLOGÍA

Se recomiendan las siguientes estrategias de la metodología de aprendizaje activo:

- Solución de un problema planteado

- Investigación bibliográfica
- Conferencia
- Aprendizaje basado en fenómenos: observación, discusión y análisis de procesos, problemas o fenómenos
- Aprendizaje colaborativo y trabajo en equipo
- Demostración y ejercicios prácticos

EVALUACIÓN

Participación	15%
Trabajos parciales	30%
Composiciones	15%
Examen final	20%
Experiencia de inmersión	<u>20%</u>
TOTAL	100%

AVALÚO DEL APRENDIZAJE

Se aplica la rúbrica de avalúo institucional a la actividad central del curso.

BIBLIOGRAFÍA

TEXTO

Atkins,P., De Paula, J. & Keeler, J.(2018). *Physical Chemistry* (11thed.). Oxford University Press.

REFERENCIAS

Engel, T. (2019). *Physical Chemistry: Quantum Chemistry and Spectroscopy*(4thed.). Pearson.

Tinoco, I., Sauer, K.,Wang, J., Puglisi, J., Harbison,G. & Rovnyak,D. (2014). *Physical Chemistry: Principles and Applications in Biological Sciences* (5th ed.). Pearson.

RECURSOS ELECTRÓNICOS

Massachusetts Institute of Technology (2020). MITOPENCOURSEWARE.

<https://ocw.mit.edu/courses/chemistry/5-60-thermodynamics-kinetics-spring-2008/lecture-notes/>

Scientific Research an Academic Publisher (2011-2020). Open Journal of Physical Chemistry. <https://www.scirp.org/journal/ojpc/>

Puede encontrar más recursos de información relacionados a los temas del curso en la página de la biblioteca <http://biblioteca.sagrado.edu/>

ACOMODO RAZONABLE

Para obtener información detallada del proceso y la documentación requerida, debe visitar la oficina correspondiente. Para garantizar igualdad de condiciones, en cumplimiento de la Ley ADA (1990) y el Acta de Rehabilitación (1973), según enmendada, todo estudiante que necesite servicios de acomodo razonable o asistencia especial deberá completar el proceso establecido por la Vicepresidencia de Asuntos Académicos.

INTEGRIDAD ACADÉMICA

Esta política aplica a todo estudiante matriculado en la Universidad del Sagrado Corazón para tomar cursos con o sin crédito académico. Una falta de integridad académica es todo acto u omisión que no demuestre la honestidad, transparencia y responsabilidad que debe caracterizar toda actividad académica. Todo estudiante que falte a la política de honradez, fraude y plagio se expone a las siguientes sanciones: recibirá nota de cero en la evaluación y/o repetición del trabajo en el seminario, nota de F(*) en el seminario: suspensión o expulsión según se establece en el documento de Política de Integridad Académica con fecha de efectividad de noviembre 2022.

Derechos reservados | Sagrado | Noviembre, 2022