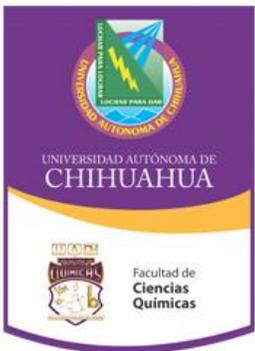


<p style="text-align: center;"><b>UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</b></p>  <p style="text-align: center;"><b>FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS</b></p> <p style="text-align: center;"><b>PROGRAMA DEL CURSO: FISICOQUÍMICA AVANZADA</b></p>	<b>DES:</b>	Ingeniería
	<b>Programa(s) Educativo(s):</b>	Maestría en Ciencias en Química
	<b>Tipo de materia (Obli/Opta):</b>	Optativa
	<b>Clave de la materia:</b>	205MQ
	<b>Semestre:</b>	2º o 3º
	<b>Créditos</b>	6
	<b>Total de horas por semana:</b>	6
	<i>Teoría: Presencial o Virtual</i>	3
	<i>Laboratorio o Taller:</i>	3
	<i>Prácticas:</i>	
	<i>Trabajo extra-clase:</i>	
	<b>Créditos Totales:</b>	6
	<b>Total de horas semestre (x 16 sem):</b>	96
<b>Fecha de actualización:</b>	Noviembre 2016	
<b>Prerrequisito (s):</b>		

**Propósito del curso:**

Explica los fenómenos que ocurren en diversos sistemas químicos a nivel de estructura molecular basado en los principios de la termodinámica estadística y de la mecánica cuántica, lo que le permitirá una mejor comprensión teórico-experimental de la disciplina.

<b>COMPETENCIAS</b> (Tipo y nombre de las competencias)	<b>DOMINIOS COGNITIVOS</b> (Objetos de aprendizaje, temas y subtemas)	<b>RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>
<p><b>CG2 GESTIÓN DEL CONOCIMIENTO</b> Demuestra conocimientos y habilidades para la búsqueda, análisis crítico, síntesis y procesamiento de información para su transformación en conocimiento con actitud ética</p> <p><b>CG3 COMUNICACIÓN CIENTÍFICA</b> Difunde con responsabilidad ética y social el conocimiento científico, tecnológico, artístico y/o humanístico que produce de forma objetiva.</p>	<p><b>1. TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA</b></p> <p>1.1 Fundamentos de Probabilidad 1.2 Distribución de Boltzmann 1.3 Energía Interna y Entropía 1.4 Función de Partición <i>1.4.1 Aplicación Para Obtención De Parámetros Termodinámicos</i></p>	<p>Construye y utiliza la función de partición para predecir parámetros termodinámicos en sistemas moleculares</p> <p>Accede a diferentes fuentes de información de calidad. <b>(CG2)</b></p> <p>Utiliza un segundo idioma, preferentemente el inglés, con claridad y corrección para comunicarse en contextos cotidianos, académicos, profesionales y científicos. <b>(CG3)</b></p>

<p><b>QUIM1 QUÍMICA DE PROCESOS</b> Modifica y adapta procesos de síntesis de diversos materiales orgánicos o inorgánicos, de escala laboratorio a planta piloto e industrial con un enfoque sostenible para implementar mejoras que permitan una mayor competitividad de la industria química nacional</p> <p><b>QUIM4 QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL</b> Aplica los fundamentos y métodos de la química teórica con énfasis en el modelado de fenómenos fisicoquímicos que permita dar respuesta a problemáticas del entorno en las áreas de salud, medio ambiente y energía.</p> <p><b>QUIM5 QUÍMICA DE MATERIALES</b> Describe las propiedades de los materiales de interés industrial y tecnológico, empleando los fundamentos y métodos de, física, química y matemáticas.</p>	<p><b>2. REACCIONES QUÍMICAS: EQUILIBRIO, CINÉTICA Y DINÁMICA MOLECULAR</b></p> <p>2.1 Espontaneidad de las Reacciones</p> <p>2.1.1 <i>Introducción al Software Disponible</i></p> <p>2.2 Colisiones Moleculares</p> <p>2.3 Velocidad de Reacción</p> <p>2.4 Reacciones Electrónicas</p> <p><b>3. TEORÍA Y APLICACIÓN DE LA MECÁNICA CUÁNTICA</b></p> <p>3.1 Mecánica Clásica</p> <p>3.2 La Dinámica de Sistemas Microscópicos</p> <p>3.3 Principios de la Mecánica Cuántica</p> <p>3.4 Oscilador Armónico</p> <p>3.5 Rotor Rígido</p> <p>3.5.1 <i>Estructura Atómica y Espectro del Hidrógeno</i></p> <p>3.6 Simetría y Teoría de Grupos</p>	<p>Utiliza modelos fisicomatemáticos para explicar las propiedades físicas y químicas de materiales. <b>(QUIM5)</b></p> <p>Explica mediante el uso de software pertinente los equilibrios de fases con multicomponentes, basados en la minimización de la energía libre de Gibbs para un sistema reactivo</p> <p>Distingue entre diversos mecanismos de reacción, usando la información de la cinética de la reacción</p> <p>Interpreta los resultados de diversas técnicas electroanalíticas</p> <p>Interpreta las variables de un proceso para lograr el control integral de las variables de un producto <b>(QUIM1)</b></p> <p>Explica las bases que fundamentan los métodos (HF y DFT) que aproximan una solución a la ecuación de Schrödinger para moléculas</p> <p>Interpreta espectros ro-vibracionales en base a cálculos sencillos en Gaussian, PGOPHER y WebMO</p>
---	---	--

	<p>3.7 Espectros Rotacionales y Vibracionales</p> <p>3.8 Panorama General de los Métodos Disponibles en Química Computacional</p>	<p>Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia. <b>(QUIM4)</b></p>
--	---	--

<b>OBJETO DE APRENDIZAJE</b>	<b>METODOLOGIA</b> (Estrategias, secuencias, recursos didácticos)	<b>EVIDENCIAS DE APRENDIZAJE</b>
<p><b>Termodinámica Estadística.</b> Construye y utiliza la función de partición para predecir parámetros termodinámicos en sistemas moleculares</p> <p>Accede a diferentes fuentes de información de calidad. <b>(CG2)</b></p> <p>Utiliza un segundo idioma, preferentemente el inglés, con claridad y corrección para comunicarse en contextos cotidianos, académicos, profesionales y científicos. <b>(CG3)</b></p> <p>Utiliza modelos fisicomatemáticos para explicar las propiedades físicas y químicas de materiales. <b>(QUIM5)</b></p> <p><b>Reacciones Químicas: Equilibrio, Cinética y Dinámica Molecular.</b> Explica mediante el uso de software pertinente los equilibrios de fases con multicomponentes, basados en la minimización de la energía libre de Gibbs para un sistema reactivo</p> <p>Distingue entre diversos mecanismos de reacción, usando la información de la</p>	<p>Esquemas</p> <p>Cuadros comparativos</p> <p>Cartografía conceptual</p> <p>Aprendizaje basado en problemas</p> <p>Reporte de Laboratorio</p> <p>Secuencia didáctica</p> <p>Proyectos de investigación</p> <p>Investigación documental</p> <p>Resolución de problemas y ejercicios</p> <p>Miniccoloquios</p> <p>Aprendizaje autónomo y reflexivo</p> <p>Prácticas supervisadas</p> <p>Juegos de roles</p> <p>Aprendizaje cooperativo</p> <p>Simuladores</p> <p>Construcción de dispositivos</p> <p>Proyector,</p> <p>Marcadores</p> <p>Pizarrón</p> <p>Guía de estudio</p> <p>Bases de datos</p> <p>Software especializado</p> <p>Instrumentos analíticos</p>	<p>Cartografía Conceptual presentada en inglés sobre la Función de Partición Q</p> <p>Hoja de cálculo o programa validado para la obtención de un parámetro termodinámico a partir de la función de partición.</p> <p>Reporte de proyecto de investigación apoyado con el software especializado. Se deberá presentar tanto investigación documental como los archivos de salida del software, así como su interpretación. (Lista de Cotejo)</p> <p>Presentación de un cartel basado en la V Heurística con la</p>

<p>cinética de la reacción</p> <p>Interpreta los resultados de diversas técnicas electroanalíticas</p> <p>Interpreta las variables de un proceso para lograr el control integral de las variables de un producto (<b>QUIM1</b>)</p> <p><b>Teoría y Aplicación de la Mecánica Cuántica.</b> Explica las bases que fundamentan los métodos (HF y DFT) que aproximan una solución a la ecuación de Schrödinger para moléculas</p> <p>Interpreta espectros ro-vibracionales en base a cálculos sencillos en Gaussian, PGOPHER y WebMO</p> <p>Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia. (<b>QUIM4</b>)</p>		<p>siguiente problemática: desarrollo de técnicas electroanalíticas para la determinación de capacidad antioxidante. (Rúbrica)</p> <p>Cuadro comparativo mostrando un exhaustivo análisis del HF vs DFT.</p> <p>Archivos de salida de frecuencias vibracionales, Raman e IR de moléculas reportadas en literatura reciente.</p> <p>Reporte de práctica de la obtención del espectro ro-vibracional del metano interpretado con apoyo del espectro simulado en software especializado. (Lista de Cotejo)</p> <p>Cuestionario Escrito</p>
--	--	---

<b>FUENTES DE INFORMACIÓN</b> (Bibliografía, direcciones electrónicas)	<b>EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES</b> (Criterios e instrumentos)
<p>Engel T., Reid P. Physical Chemistry 3<sup>rd</sup> Edition. Pearson Education Limited. (2014).</p> <p>Atkins P., De Paula J. Atkins' Physical Chemistry 8<sup>th</sup> Edition. Oxford University Press. (2006).</p>	<p><b>Diagnostica:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Cuestionarios o discusiones guiadas acerca del conocimiento previo de la asignatura.</li> </ul> <p><b>Continua:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Tareas asignadas.</li> </ul> <p><b>Reconocimientos parciales:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Actividades de aplicación de conocimientos, tales como: el desarrollo de proyectos.</li> <li>▪ Cuestionarios.</li> </ul> <p><b>Reconocimiento final:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Presentación del cartel mostrando los resultados de su proyecto particular, centrado en la explicación de los fenómenos fisicoquímicos que ocurren en una lámpara de halogenuro metálico.</li> </ul> <p><b>Criterios de evaluación:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cuestionarios: 30%;</li> </ol>

	<p>2. Tareas: 10%; además son requisito para tener derecho a contestar los cuestionarios</p> <p>3. Otras estrategias de evaluación: 60%; entre ellas el uso de rubricas y listas de cotejo para evaluar, proyectos, reportes escritos, carteles, etc.</p>
--	---

### Cronograma de Avance Programático

Unidades de aprendizaje	Semanas															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Termodinámica Estadística	X	X	X	X	X											
Reacciones Químicas: Equilibrio, Cinética y Dinámica Molecular						X	X	X	X	X	X					
Teoría y Aplicación de la Mecánica Cuántica.												X	X	X	X	X