

<p style="text-align: center;">UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p>  <p style="text-align: center;">UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p> <p style="text-align: center;">UNIDAD ACADÉMICA: FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS</p> <p style="text-align: center;">PROGRAMA DEL CURSO: FISICOQUÍMICA AVANZADA</p>	DES:	Ingeniería
	Programa(s) académico(s)	Maestría en Ciencias en Química.
	Tipo de Materia: <i>Obligatoria / Optativa.</i>	Optativa
	Clave de la Materia:	MQ303
	Semestre:	Segundo o tercero
	Área en plan de estudios (B,P,E, O):	E
	Total de horas por semana:	6
	Laboratorio o Taller:	0
	h./semana trabajo presencial/virtual	4
	h./semana laboratorio/taller	0
	h. trabajo extra-clase:	2
	Total de horas por semestre: <i>Total de horas semana por 16 semanas.</i>	96
	Créditos totales:	6
	Fecha de actualización:	15/12/2024
Responsables del diseño del programa del curso:	J. P. Palomares Báez. M. A. Chávez R. J. M. Nápoles D.	
Prerrequisito (s):	Ninguno	

DESCRIPCIÓN DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/ 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.

COMPETENCIA PRINCIPAL QUE SE DESARROLLA:

QUIM4 – QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL.

Aplica los métodos de la química teórica y computacional en el modelado de fenómenos fisicoquímicos que contribuyen a la verificación de hipótesis en la resolución de problemas multidisciplinarios.

OTRAS COMPETENCIAS A LAS QUE SE CONTRIBUYE CON EL DESARROLLO DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/CURSO:

T3. FRONTERAS DEL CONOCIMIENTO Y LIDERAZGO CIENTÍFICO (EXCELENCIA Y VANGUARDIA).

Se centra en el desarrollo del pensamiento crítico, el conocimiento de innovaciones científicas, tecnológicas, humanísticas y artísticas para resolver problemas. Resalta la importancia de habilidades digitales, la colaboración en propuestas innovadoras, y el discernimiento ético para asegurar soluciones solidarias, responsables y sostenibles, bajo criterios de equidad e inclusión. Enfatiza la participación en contextos culturales diversos, el desarrollo socioemocional, y la formación continua. Las acciones incluyen la difusión de conocimientos, saberes y la promoción de proyectos innovadores desde las distintas disciplinas o tecnológicamente avanzados. Se aplica una visión centrada en la excelencia y vanguardia, considerando aspectos clave como la formación integral del estudiante. Esto implica no solo enfocarse en habilidades técnicas y conocimientos especializados, sino también en el desarrollo de habilidades blandas.

DOMINIOS	OBJETOS DE ESTUDIO	RESULTADOS DE APRENDIZAJE	METODOLOGÍA	EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO
QUIM4.4. Construye el Hamiltoniano y escribe la ecuación de Schrödinger de sistemas polielectrónicos en moléculas y sistemas atómicos de interés científico y tecnológico.	Objeto de estudio 1. Teoría y Aplicación de la Mecánica Cuántica. 3.1 Principios de la Mecánica Cuántica. 3.2 Oscilador armónico. 3.3 Rotor rígido.	Utiliza modelos fisicomatemáticos para explicar las propiedades físicas y químicas de materiales. Utiliza los principios de la mecánica cuántica para predecir las contribuciones de cada estado cuántico a las	Exposición del profesor. Investigación documental. Tareas Individuales.	Examen escrito. Problemario. Exposición.

T3.1 Desarrollo del pensamiento crítico a partir de la libertad, el análisis, la reflexión y la argumentación.	3.4 Estructura atómica y espectro del hidrógeno. 3.5 Espectros rotacionales y vibracionales.	propiedades espectroscópicas de sistemas moleculares.		
QUIM4.1. Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos, a partir de las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico.	Objeto de estudio 2. Termodinámica estadística. 2.1 Distribución de Boltzmann. 2.2 Energía interna y entropía. 2.3 Función de Partición. 2.4 Relación con las variables termodinámicas.	Construye y utiliza la función de partición para predecir parámetros termodinámicos en sistemas moleculares. Accede a diferentes fuentes de información de calidad.	Exposición del profesor. Investigación documental. Tareas Individuales. Prácticas de laboratorio computacional.	Examen escrito. Problemario. Exposición. Reporte de práctica.
QUIM4.5. Justifica la selección de la metodología de cálculo apropiada a la entidad molecular bajo estudio. T3.7. Habilidades digitales y uso responsable de las tecnologías de la información, comunicación, conocimiento y aprendizaje, en el proceso de construcción de saberes.	Objeto de estudio 3. Dinámica de reacciones moleculares. 3.1 Dinámica de los gases. 3.2 Propiedades dinámicas y estructurales de los líquidos. 3.3 Difusión. 3.4 Teoría de colisiones moleculares. 3.5 Teoría del complejo activado. 3.6 Cálculo de propiedades.	Comprende la cinética de reacciones químicas a partir de las interacciones moleculares. Interpreta espectros rovibracionales con base en cálculos computacionales sencillos.	Exposición del profesor. Investigación documental. Tareas Individuales. Prácticas de laboratorio computacional.	Examen escrito. Problemario. Exposición. Reporte de práctica.

FUENTES DE INFORMACIÓN	EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES
<p>Atkins, P. W., De Paula, J., & Keeler, J. (2023). <i>Atkins' physical chemistry</i>. Oxford University press.</p> <p>Engel, T. (2006). <i>Quantum chemistry and spectroscopy</i>. Pearson Education India.</p> <p>Engel, T., Reid, P., Hehre, W., Rodríguez, A. R., Román, J. Z., &</p> <p>Pascual, A. B. (2006). <i>Química física</i> (No. 541.3076 E5QU5). Pearson Addison Wesley.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • ESTRATEGIAS Todos los objetos serán evaluados mediante heteroevaluación. OBJETO 1 (100 %)/3 Examen escrito 60% Problemario 20% Exposición 20% OBJETO 2 (100 %)/3 Examen escrito 40% Problemario 20% Exposición 20% Reporte de práctica 20% OBJETO 3 (100 %)/3 Examen escrito 40% Problemario 20% Exposición 20% Reporte de práctica 20% • INSTRUMENTOS Plataforma moodle. • Tareas • Exámenes <p>Presentación de reportes escritos. Se emplea rúbrica.</p>

Perfil del docente que impartir el curso

El docente deberá tener estudios de Doctorado en ciencias, preferentemente en las áreas de química, física o materiales, poseer conocimientos sobre química cuántica y computacional, manejo de programas de cálculos químico-cuánticos y dinámica molecular. Experiencia técnica pedagógica en el área de la química, además de contar con experiencia en el desarrollo de proyectos de investigación multidisciplinarios y experiencia en la redacción de artículos científicos.

