

PROGRAMA DE LA ASIGNATURA MATEMATICA 4

SEM	CODIGO	TEORIA	PRACT	LAB	U.C.	PRELACIONES
4	414614	4 H/T	2H/P	0	5	.

Justificación

El contenido de esta asignatura sirve como base y herramientas fundamentales en las asignaturas fisicoquímica 2 y 3, Química analítica e inorgánica, asignaturas del cuarto y quinto semestre de la carrera en química. Las ecuaciones diferenciales y sus soluciones son fundamentales en el desarrollo de la cinética química, la química cuántica y la espectroscopía atómica y molecular. La introducción a los conceptos de teoría de grupo es importante para los cursos de orgánica e inorgánica. El desarrollo de modelos estadísticos es fundamental en todas las áreas de la química y especialmente en la química analítica. Finalmente, el tema de probabilidad y estadística es fundamental en la planificación, toma e interpretación de datos en la química experimental.

Objetivos generales:

- a) Desarrollar las destrezas necesarias para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias y ecuaciones sencillas en derivadas parciales.
- b) Introducción a las transformaciones de Fourier y Laplace y sus aplicaciones en química.
- c) Adquirir los conocimientos básicos de la teoría de grupo y su aplicación a las moléculas químicas.
- d) Adquirir los conocimientos básicos y desarrollar las destrezas necesarias para aplicar la teoría de probabilidades y de inferencia estadística a problemas químicos.
- e) Conocer y aplicar la estadística en el tratamiento de datos experimentales.

Contenido

- 1 Ecuaciones diferenciales

- 1.1 Ecuaciones diferenciales de primer orden. Aplicaciones: velocidad de una reacción química, cambio de fases de una sustancia.
- 1.2 Diferenciales exactas e inexactas. Factores integrantes. Ejemplo: Funciones termodinámicas.
- 1.3 Ecuaciones diferenciales de segundo orden con coeficientes constantes. Aplicación: parte radial de ecuación de Schrodinger en una dimensión.
- 1.4 Método de solución por series de potencia.
- 1.5 Introducción a las ecuaciones diferenciales parciales. Método de separación de variables. Aplicación: separación de ecuación de Schrodinger, independiente del tiempo, para el átomo de hidrógeno en parte radial y angular.
- 1.6 Funciones especiales como soluciones de ecuaciones diferenciales: Hermite, Legendre, Bessel y Laguerre. Aplicación: Ecuación de Schrodinger para un oscilador armónico en una dimensión.

2 Transformadas.

- 2.1 Series de Fourier.
- 2.2 Aplicaciones a la resolución de ecuaciones diferenciales.
- 2.3 Transformada de Fourier.
- 2.4 Transformada de Laplace

3 Teoría de grupos.

- 3.1 Definiciones y teoremas fundamentales de la teoría de grupo: grupo abeliano.
- 3.2 Elementos y operaciones de simetría.
- 3.3 Representación de las operaciones de simetría mediante matrices.
- 3.4 Algunos grupos de simetría, ejemplo: grupo de simetría del triángulo equilátero
- 3.5 Ordenes, clases y representaciones.
- 3.6 Representaciones reducibles e irreducibles, tabla de caracteres y reducción de una representación reducible.
- 3.7 Subgrupos y productos de grupos.
- 3.8 Aplicaciones en química.

3.8.1 Vibraciones y rotaciones moleculares: determinación de las bandas activas e inactivas en los espectros vibracionales y rotacionales.

3.8.2 Orbitales moleculares.

4 Probabilidad y estadística.

4.1 Importancia de la estadística en la investigación científica.

4.2 Revisión de conceptos fundamentales.

4.3 Teoría básica de probabilidad y estadística. Probabilidad. Esperanza.

4.4 Distribuciones de probabilidad. Valores esperados.

4.5 Elementos de muestreo. Población y muestra. Tipos de muestras.

4.6 Presentación de datos. Determinación de los parámetros estadísticos de la muestra.

4.7 La media aritmética y geométrica. La mediana.

4.8 Distribuciones de muestreo.

4.9 Inferencia estadística.

4.10 Análisis de regresión de una variable.

4.11 Regresión no lineal.

4.12 Método de los mínimos cuadrados.

4.13 Análisis de correlación.

4.14 Aplicaciones:

a) Determinación de media aritmética de un conjunto de medidas, error estándar de una medida, error estándar del promedio, error probable de una medida.

b) Errores de mediciones de diferentes propiedades usando diferentes instrumentos en un laboratorio.

c) Determinación de valores para ciertas propiedades de sistemas por métodos gráficos usando mediciones de propiedades del sistema.

Metodología.

a) Combinación de clases magistrales expositivas e interactivas.

b) Establecer un problemario oficial para el curso.

- c)* Sesiones de resolución de problemas. Los problemas estarán orientados a la aplicación de la teoría desarrollada en clase a sistemas químicos y al tratamiento de datos experimentales incluyendo uso de programas de computación apropiados.
- d)* Atención personalizada dos horas por semana.

Evaluación sugerida.

- a)* Realizar, al menos, una evaluación escrita por tema.
- b)* Confeccionar las evaluaciones tomando en cuenta el material oficial del curso.
- c)* Todos los temas deben tener el mismo peso en la nota final por la asistencia y participación en las sesiones de problemas un peso.

Bibliografía

- [1] L. Seymour, *introducción a la probabilidad y estadística*, McGraw Hill, Madrid, 2000
- [2] Davidson G., *Introducción a la teoría de Grupos para Químicos*, Editorial Reverté, Barcelona, 1979.
- [3] Barrante James R., *Applied Mathematics for physical Chemistry*, Prentice Hall, 2nd edition, New Jersey, 1998.
- [4] Steiner Erich, *The Chemistry Maths Book*, Oxford University Press, Oxford, 1997.