



# Universidad de Puerto Rico

Recinto de Río Piedras  
Facultad de Ciencias Naturales  
Departamento de Matemáticas  
Programa Subgraduado



## MATE 3163 – SÍLABO

### Título del Curso

Métodos Matemáticos para Química Física

### Codificación

MATE 3163

### Número de Horas / Créditos

Cuatro (4) créditos. Cuatro horas de conferencia y una hora de taller a la semana.

### Prerrequisitos

MATE 3151 (o su equivalente), QUIM 3001-3002 (o su equivalente).

### Descripción del Curso

This course has been designed for Chemistry students. The purpose is to expose the student to a series of techniques and topics at an opportune moment in his or her academic training. It also includes the use, at all times, of a computer algebraic system (CAS). The topics to be covered are the following:

Integral Calculus: antiderivatives, indefinite and improper integrals. Integration methods, numerical integration. Probability distributions and mean values. Series and transforms: Fourier, Laplace. Several variables calculus: partial derivatives, exact and inexact differentials, multiple and line integrals. Extreme values in several variables. Differential equations: Newton's Laws, harmonic oscillator, separable equations, exact and inexact equations, partial derivatives equations. Solution methods: Laplace transform, numerical. Operators, matrices and group theory. Cramer's rule, matrix inverses. Experimental data treatment: random errors, data reduction, error propagation, least squares method.

Curso diseñado para estudiantes de química. El propósito es exponer al estudiante a una serie de técnicas y tópicos en un momento oportuno en su preparación académica. Incluye además la utilización, en todo momento, de un sistema algebraico computadorizado (CAS por sus siglas en inglés). Los temas a cubrirse son los siguientes:

Cálculo integral: antiderivadas, integrales indefinidas e impropias. Métodos de integración, integración numérica. Distribuciones de probabilidad y valores medios. Series y transformadas: Fourier, Laplace. Cálculo de varias variables: derivadas parciales, diferenciales exactas e inexactas, integrales múltiples y de línea. Valores extremos en varias variables. Ecuaciones diferenciales: Leyes de Newton, Oscilador armónico, ecuaciones separables, ecuaciones exactas e inexactas, ecuaciones de derivadas parciales. Métodos de solución: transformada de Laplace, numérico. Operadores, matrices y teoría de grupos. regla de Cramer, inversos de matrices. Tratamiento de datos experimentales: errores aleatorios, reducción de datos, propagación de errores, método de mínimos cuadrados.

<b>Fecha de Vigencia:</b>	SEGUNDO SEMESTRE DEL AÑO ACADÉMICO 2025-2026
<b>Salón y Horario:</b>	MATE 3163 – Sección 0U1 LW 0700AM-0750AM MJ 0700AM-0820AM SALÓN A-231 (CNL) <a href="http://icardona.org">http://icardona.org</a>
<b>Información del Profesor:</b>	Iván Cardona Torres Oficina A-117 (CNL) Phone: (787) 764-0000 x 88271 e-mail: ivan.cardona1@upr.edu
<b>Horas de Oficina:</b>	LW 0800AM-0900AM M 1000AM-1230PM J 1000AM-1130AM L 1030AM-1100AM

## Objetivos del Curso

### Objetivos Generales

- Exponer al estudiante a una serie de técnicas (matemáticas) y tópicos (matemáticos) en un momento oportuno en su preparación académica como químicos.
- Aplicar las Matemáticas a problemas de interés específico para químicos, biólogos e ingenieros.
- Utilizar conceptos y cálculos matemáticos para entender propiedades químicas y describir el comportamiento de la materia cinético-molecular y condensada.
- Enfatizar la naturaleza interdisciplinaria de la Química Física.
- Desarrollar destrezas cuantitativas de alto nivel necesarias para el entendimiento de las distintas teorías presentadas en la Química Física.

### Objetivos Específicos

En este curso los estudiantes:

- obtendrán una integral indefinida para ciertos integrandos mediante el uso de tablas de integrales;
- calcularán una integral definida utilizando la integral indefinida y entender su rol como un incremento en la antiderivada;
- entenderán la relación entre una integral definida y el área debajo de la gráfica del integrando;
- obtendrán un valor aproximado de la integral definida utilizando análisis numérico;
- manipularán integrales a formas manejables mediante el uso de fracciones parciales, el método de sustitución y el método de integración por partes;
- calcularán valores medios de cantidades utilizando la distribución de probabilidad de una variable aleatoria;
- determinarán si una serie con términos constantes converge;
- calcularán los coeficientes para la serie de potencias que representa a una función dada;

- determinarán el intervalo de convergencia de una serie de potencias;
- determinarán los coeficientes de la serie de Fourier para representar algunas funciones elementales;
- determinarán la transformada de Fourier para algunas funciones elementales;
- determinarán la transformada de Laplace para algunas funciones elementales;
- manipularán la transformada de Laplace utilizando varios teoremas;
- escribirán fórmulas para las derivadas parciales y para la diferencial de una función de varias variables;
- ejecutarán un cambio de variables independientes para obtener fórmulas que relacionen diferentes derivadas parciales;
- utilizarán identidades que envuelven derivadas parciales para eliminar cantidades indeseables en fórmulas de termodinámica;
- identificarán una diferencial exacta y un factor de integración;
- evaluarán una integral de línea con dos variables independientes;
- evaluarán una integral múltiple;
- cambiarán variables independientes en una integral múltiple;
- utilizarán operadores de derivadas vectoriales;
- encontrarán máximos y mínimos de funciones de varias variables con y sin restricciones en el dominio;
- construirán una ecuación de movimiento para una partícula a partir de la segunda ley de Newton;
- resolverán una ecuación diferencial lineal homogénea con coeficientes constantes;
- resolverán una ecuación diferencial separable;
- resolverán una ecuación diferencial exacta;
- utilizarán factores de integración para resolver una ecuación diferencial inexacta;
- resolverán ecuaciones diferenciales parciales sencillas mediante el método de separación de variables;
- resolverán una ecuación diferencial mediante el uso de transformadas de Laplace;
- utilizarán un CAS (e.g. Mathematica) para resolver simbólicamente y numéricamente ecuaciones diferenciales;
- realizarán las operaciones elementales de álgebra de operadores;
- identificarán y utilizarán operadores de simetría asociados a una molécula;
- realizarán las operaciones elementales de álgebra de matrices, incluyendo la multiplicación y la búsqueda de inversas de matrices;
- identificarán un grupo de operadores simetrías y construir la tabla de multiplicación para este grupo;
- resolverán cualquier sistema relativamente sencillo de ecuaciones lineales mediante el método de eliminación de variables;
- resolverán un sistema no homogéneo de ecuaciones lineales utilizando la regla de Cramer e inversión de matrices;
- resolverán un sistema homogéneo de ecuaciones lineales utilizando la condición de dependencia;
- identificarán posibles fuentes de error en un experimento de química física y clasificar los errores como sistemáticos o aleatorios;
- calcularán la media y desviación estándar de una muestra de medidas;
- calcularán el error probable en la medida de una cantidad medible;
- realizar reducción de data numéricamente utilizando mínimos cuadrados y otros métodos numéricos y determinar los errores probables, de ciertas cantidades, obtenidos con estos métodos;

## Contenido Temático

### Bosquejo del contenido y Distribución del Tiempo

Sección del Texto	Tema	Tiempo (en horas)
5.1-5.2	La antiderivada de una función .....	1.0 horas
5.3	El proceso de integración .....	1.0 horas
5.4	Integrales impropias .....	1.0 horas
	Laboratorio CAS ("Computer Algebraic System")-1 .....	1.0 horas
5.5	Métodos de integración .....	2.0 horas
5.6	Integración Numérica .....	1.5 horas
5.7	Distribuciones de probabilidad .....	2.5 horas
	Laboratorio CAS-2 .....	1.0 horas
6.1	Series de constantes .....	2.0 horas
6.2	Series de funciones .....	3.0 horas
	Laboratorio CAS-3 .....	1.0 horas
6.3	Series de Fourier .....	2.0 horas
6.4	Operaciones matemáticas en series .....	0.5 horas
6.5	Transformadas de integrales .....	1.5 horas
	Laboratorio CAS-4 .....	1.0 horas
7.1	Funciones de varias variables .....	1.5 horas
7.2	Cambio de variables .....	1.0 horas
7.3	Relaciones adicionales entre derivadas parciales .....	1.5 horas
	Laboratorio CAS-5 .....	1.0 horas
7.4	Diferenciales exactas e inexactas .....	1.0 horas
7.5	Integrales de línea .....	2.0 horas
7.6	Integrales múltiples .....	2.0 horas
	Laboratorio CAS-6 .....	1.0 horas
7.7	Operadores de derivadas vectoriales .....	2.0 horas
7.8	Valores extremos de funciones de varias variables .....	2.0 horas
	Laboratorio CAS-7 .....	1.0 horas
8.1	Ecuaciones diferenciales y las leyes de movimiento de Newton .....	1.0 horas
8.2	El oscilador armónico .....	2.0 horas
	Laboratorio CAS-8 .....	1.0 horas
8.3	Ecuaciones diferenciables separables .....	1.0 horas
8.4	Ecuaciones diferenciables exactas .....	1.0 horas
8.5	Ecuaciones diferenciables inexactas: factores de integración ...	1.0 horas
8.6	Ecuaciones diferenciables parciales: ondas en una cuerda .....	1.0 horas
	Laboratorio CAS-9 .....	1.0 horas
8.7	Solución de ecuaciones mediante la transformada de Laplace .	1.0 horas
8.8	Soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales .....	2.0 horas
9.1	Operadores y álgebra de operadores .....	1.0 horas
	Laboratorio CAS-10 .....	1.0 horas
9.2	Operadores simétricos .....	2.0 horas
9.3	Álgebra de matrices .....	2.0 horas
	Laboratorio CAS-11 .....	1.0 horas
9.5	Introducción a la teoría de grupos .....	2.0 horas
10.2	Regla de Cramer .....	1.0 horas
10.3	Solución mediante inversión de matrices .....	2.0 horas
	Laboratorio CAS-12 .....	1.0 horas
11.1	Errores experimentales .....	1.0 horas
11.2	Tratamiento estadístico de errores aleatorios .....	2.0 horas
	Laboratorio CAS-13 .....	1.0 horas
11.3	Reducción de datos y propagación de errores .....	1.5 horas
11.4	Reducción de datos gráfica y numéricamente .....	1.5 horas
	Laboratorio CAS-14 .....	1.0 horas
11.5	El método de mínimos cuadrados .....	3.0 horas
	Laboratorio CAS-15 .....	1.0 horas
	TOTAL DE HORAS	75.0 horas

## Técnicas Instruccionales

Nuestros cursos están centrados en la interacción del maestro y el estudiante como colaboradores en la comprensión y solución de problemas de contenido matemático.

Este curso está programado para ofrecerse de manera **presencial**. Sin embargo, *de surgir alguna interrupción de las clases durante el semestre se continuarán ofreciendo las mismas utilizando la modalidad a distancia o en línea para cumplir con el prontuario*. Específicamente, de cambiar a una modalidad a distancia, **el curso se ofrecerá completamente en línea, mediante videoconferencias asincrónicas** equivalentes a setenta y cinco (75) horas contacto. Para impartir la clase, utilizaremos las siguientes herramientas tecnológicas.

- Moodle
- BigBlueButton
- Google Classroom
- Google Meets
- Google Sites
- Google Forms
- Microsoft Teams
- WeBWork
- Página del Departamento de Matemáticas
- Página del Profesor
- YouTube
- Internet

Muchas de las herramientas arriba pueden ser encontradas en <https://enlinea.uprrp.edu/estudiantes/>.

## Métodos alternos de enseñanza<sup>1</sup>

La Certificación Núm 112 (2014-2015) de la Junta de Gobierno define un curso presencial como un curso en el cual 75% o más de las horas de instrucción requieren la presencia física del estudiante y el profesor en el salón de clases. Esto quiere decir que 25% de un curso presencial, pudiera ofrecerse sin requerir la presencia física de los estudiantes y el profesor en el salón de clases. En caso de ser necesario, este curso podrá completar hasta 25% de las horas contacto (18.75 horas) de forma no presencial por métodos alternos como, por ejemplo: Video-conferencias, módulos instruccionales, foros de discusión y cibercharlas entre otros. De ser así, se modificará el calendario/temario para incluir los temas que serán cubiertos por métodos alternos.

## Recursos de Aprendizaje

Salón de clases y libro de Texto. Algún Sistema Algebraico Computarizado (CAS) (e.g. Mathematica, Maple). Acceso, una vez por semana a un salón con computadoras (al menos una (1) computadora por cada dos (2) estudiantes).

## Técnicas de Evaluación

Las calificaciones se asignarán a base de 3 exámenes parciales (E1, E2, E3) y un examen final (que contará doble, F1, F2). El promedio final se calculará a base de las cinco notas (5) eliminándose la menor de las cinco. A saber,

$$\text{Promedio Final} = \frac{(E1 + E2 + E3 + F1 + F2) - \text{Minimo}(E1, E2, E3, F1, F2)}{4}$$

Habrà evaluación diferenciada a estudiantes con necesidades especiales.

---

<sup>1</sup> Este curso es presencial bajo circunstancias normales. Sin embargo, de surgir alguna interrupción de las clases durante el semestre se continuarán ofreciendo las mismas utilizando la modalidad a distancia o en línea para cumplir con el prontuario.

Por ejemplo, un estudiante cuyos puntajes sean:

$$\begin{aligned}E_1 &= 75 \\E_2 &= 59 \\E_3 &= 88 \\F_1 &= 83 \\F_2 &= F_1 = 83\end{aligned}$$

Su promedio final sería,

$$\frac{(75 + 59 + 88 + 83 + 83) - \text{Minimo}(75, 59, 88, 83, 83)}{4} = 82.25.$$

## Sistema de Calificación

A, B, C, D, F

## Acomodo Razonable

La Universidad de Puerto Rico (UPR) reconoce el derecho que tienen los estudiantes con impedimentos a una educación post secundaria inclusiva, equitativa y comparable. Conforme a su política hacia los estudiantes con impedimentos, fundamentada en la legislación federal y estatal, todo estudiante cualificado con impedimentos, tiene derecho a la igual participación de aquellos servicios, programas y actividades que están disponibles de naturaleza física, mental o sensorial y que por ello se ha afectado, sustancialmente, una o más actividades principales de la vida como lo es su área de estudios post secundarios, tiene derecho a recibir acomodos o modificaciones razonables. De usted requerir acomodo o modificación razonable en este curso, debe notificarlo al profesor sobre el mismo, sin necesidad de divulgar su condición o diagnóstico. De manera simultánea, debe solicitar a la Oficina de Servicios a Estudiantes con Impedimentos (OSEI) de la unidad o Recinto, en forma expedita, su necesidad de modificación.

## Integridad Académica

La Universidad de Puerto Rico promueve los más altos estándares de integridad académica y científica. El Artículo 6.2 del Reglamento General de Estudiantes de la UPR (Certificación Núm. 13, 2009-2010, de la Junta de Síndicos) establece que

*“la deshonestidad académica incluye, pero no se limita a: acciones fraudulentas, la obtención de notas o grados académicos valiéndose de falsas o fraudulentas simulaciones, copiar total o parcialmente la labor académica de otra persona, plagiar total o parcialmente el trabajo de otra persona, copiar total o parcialmente las respuestas de otra persona a las preguntas de un examen, haciendo o consiguiendo que otro tome en su nombre cualquier prueba o examen oral o escrito, así como la ayuda o facilitación para que otra persona incurra en la referida conducta”.*

Cualquiera de estas acciones estará sujeta a sanciones disciplinarias en conformidad con el procedimiento disciplinario establecido en el Reglamento General de Estudiantes de la UPR vigente. Para velar por la integridad y seguridad de los datos de los usuarios, todo curso híbrido, a distancia y en línea deberá ofrecerse mediante la plataforma institucional de gestión de aprendizaje o por herramientas requeridas por el curso, la cual utiliza protocolos seguros de conexión y autenticación. El sistema autentica la identidad del usuario utilizando el nombre de usuario y contraseña asignados en su cuenta institucional. El usuario es responsable de mantener segura, proteger, y no compartir su contraseña con otras personas.

## Política Institucional contra el Hostigamiento sexual en la Universidad de Puerto Rico

La Universidad de Puerto Rico prohíbe el discrimen por razón de sexo y género en todas sus modalidades, incluyendo el hostigamiento sexual. Según la Política institucional contra el Hostigamiento Sexual en la Universidad de Puerto Rico, Certificación Núm. 130, 2014-2015 de la Junta de Gobierno, si un estudiante está siendo o fue afectado por conductas relacionadas a hostigamiento sexual, puede acudir ante la Oficina de la Procuraduría Estudiantil, el Decanato de Estudiantes o la Coordinadora de Cumplimiento con Título IX para orientación y/o presentar una queja.

## Política y procedimiento para el manejo de situaciones de discrimen por sexo o género en la Universidad de Puerto Rico

La Universidad de Puerto Rico (Universidad), como institución educativa y centro laboral, tiene como norte proteger los derechos y ofrecer un ambiente seguro a todas las personas que interactúan con la institución, ya sean estudiantes, empleados, contratistas y/o visitantes (en adelante “personas concernidas”). En atención a ello, se promulga la presente Política por virtud de la Certificación 107, JG 2021-2022, con el fin de promover un ambiente de respeto a la diversidad y los derechos de los integrantes de la comunidad universitaria. Se establece el protocolo, para el manejo de situaciones relacionadas con las siguientes conductas prohibidas: discrimen por razón de sexo, género, o embarazo, hostigamiento sexual, violencia sexual, violencia doméstica, violencia en cita y acecho, (en adelante, «las conductas prohibidas»), en el ambiente de trabajo y estudio.

## Libro de Texto

Mortimer R. G., *Mathematics for Physical Chemistry, Third Edition*, Elsevier Academic Press (2011).  
ISBN-13: 978-9380931814

## Referencias

- McQuarrie D. A., and Hansen M., *Mathematics for Physical Chemistry*, University Science Books, 2008.
- Barrante J. R., *Applied Mathematics for Physical Chemistry*, 3rd ed., Prentice Hall, 2003.
- Spiegel M., Lipschutz S., *Schaum's Outline of Vector Analysis*, 2nd ed, McGraw-Hill, 2009.
- Bronson R., *Schaum's Outline of Differential Equations*, McGraw-Hill, 2009.
- Lipson M., *Schaum's Outline of Linear Algebra*, 4th ed, McGraw-Hill, 2009.

## Referencias Electrónicas

- UPRRP-Moodle: <https://online.uprrp.edu/?lang=en>
- Wolfram Demonstrations Project: <http://demonstrations.wolfram.com/index.html>
- Physical Chemistry Lecture Notes: <http://www.colby.edu/chemistry/PCChem/Lecture1.html>
- Understanding Chemistry: <http://www.chemguide.co.uk/physmenu.html>
- Mathlets: Java™ Applets for Math Explorations: <http://cs.jsu.edu/mcis/faculty/leathrum/Mathlets/>
- Symmetry Resources at Otterbein University: <http://symmetry.otterbein.edu/index.html>