

	Contenidos Programáticos Programas de Pregrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	1 de 4

FACULTAD: CIENCIAS BASICAS

PROGRAMA: QUIMICA

DEPARTAMENTO DE: QUIMICA

CURSO: **CÓDIGO:**

ÁREA:

REQUISITOS: **CORREQUISITO:**

CRÉDITOS: **TIPO DE CURSO:**

FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN

JUSTIFICACIÓN

El papel cada vez más importante de la química cuántica, hace que en la formación de nuestros estudiantes del programa de Química (y en general de todas las áreas de la química). En esta asignatura se crean espacios para comprender en detalle los métodos modernos del cálculo de estructuras electrónicas y moleculares, ensambles termodinámicos. De esta forma se está proporcionando al estudiante un conocimiento sólido de los aspectos fisicomatemáticos de la mecánica cuántica y termodinámica estadística. Además, es una asignatura fundamental para aquellos estudiantes que deseen seguir estudios de posgrado en Química.

OBJETIVO GENERAL

Proporcionar al estudiante los conceptos fisicomatemáticos de la química cuántica como parte de su formación como químico y base para continuar estudios de posgrado en química.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Desarrollar los conceptos matemáticos útiles en la química cuántica.
- Describir la ecuación de Schrödinger no relativista, como una ecuación que permite determinar el comportamiento cuántico de la energía en un sistema determinado.
- Reconocer que la formulación cuántica generaliza los métodos matemáticos clásicos en la determinación de las propiedades estáticas y dinámicas de sistema físicos.

	Contenidos Programáticos Programas de Pregrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	2 de 4

COMPETENCIAS

- Capacidad de análisis y síntesis.
- Resolución de problemas.
- Habilidades de investigación.
- Habilidades para analizar información desde diferentes fuentes

UNIDAD 1 TEORÍA CUÁNTICA: INTRODUCCIÓN Y PRINCIPIOS

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Orígenes de la mecánica cuántica	2	4
Dualidad onda partícula	2	4
Dinámica de sistemas microscópicos	2	4
La ecuación de Schrodinger	2	4
Interpretación de Born de la función de onda	2	4
Principios de la mecánica cuántica	2	4
El principio de incertidumbre	2	4
Postulados de la mecánica cuántica	2	4
TOTAL	16	32

UNIDAD 2 TEORÍA CUÁNTICA: TÉCNICAS Y APLICACIONES

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Movimiento traslacional	2	4
Partícula en una caja	2	4
Movimiento en dos y más dimensiones	2	4
Tunelamiento	2	4
Movimiento vibracional	2	4
Niveles de energía	2	4

	Contenidos Programáticos Programas de Pregrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	3 de 4

Movimiento de rotación	2	4
Movimiento de rotación en tres dimensiones, la partícula en una esfera.	2	4
El espín.	2	4
Técnicas de aproximación	2	4
Teoría de perturbaciones independientes del tiempo.	2	4
TOTAL	22	44

UNIDAD 3 ESTRUCTURA ATOMICA Y ESPECTRO ATOMICO

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Estructura y espectro de átomos hidrogenoides	2	4
Orbitales atómicos y sus energías	2	4
Espectroscopia y reglas de selección	2	4
La estructura de átomos con muchos electrones	2	4
La aproximación orbital.	2	4
Campos orbitales auto consistentes	2	4
El espectro de átomos complejos	2	4
Limites de ionización	2	4
Estados singlete y triplete.	2	4
TOTAL	18	36

UNIDAD 4 ESTRUCTURA MOLECULAR

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
La aproximación Born-Oppenheimer	2	4
Teoría de bandas de valencia.	2	4

	Contenidos Programáticos Programas de Pregrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	4 de 4

La molécula-ion de hidrógeno	2	4
Moléculas poliatómicas	2	4
TOTAL	8	16

METODOLOGÍA (Debe evidenciarse el empleo de nuevas tecnologías de apoyo a la enseñanza y al aprendizaje)

Se desarrollarán sesiones virtuales y presenciales utilizando las nuevas tecnologías de información. Las TICS, se presentan como auxiliares para el desarrollo del curso, los estudiantes usarán estas ayudas con el fin de demostrar que se han apropiado de los conceptos vistos en el curso. Esto permitirá realizar:

- Ensayos.
- Trabajos.
- Consultas.
- Desarrollo de talleres

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Para dar cumplimiento al Reglamento Académico de la Universidad de Pamplona, se harán tres evaluaciones individuales escritas conforme al calendario del período académico. Para estimular el trabajo continuo del estudiante se tendrá en cuenta la participación del alumno en la clase y la realización de tareas extra clase, lo cual será calificado y esta nota contribuirá con cada nota parcial así:

1 era Evaluación 35% 20% Evaluación de competencias 15% Evaluación de trabajo extra clase

2 da Evaluación 35% 20% Evaluación de competencias 15% Evaluación de trabajo extra clase

3 era Evaluación 30% 20% Evaluación de competencias 10% Evaluación de trabajo extra clase

BIBLIOGRAFÍA DISPONIBLE EN UNIDAD DE RECURSOS BIBLIOGRÁFICOS DE LA UNIVERSIDAD DE PAMPLONA

1. Atkins P.W., Physical Chemistry, 8th Edition, Oxford U.P., Oxford, 2002. (B. Central: 539/A873p).
2. Ira N. Levine. Química Cuántica 5 Edición. Ed Prentice Hall. (B. Central: 541.28/L665q).
3. A Szabo and NS Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, 1989. (B. Central: 541.28/S996m)
4. D. W. Ball, Fisicoquímica. (B. Central: 539/B187f).

	Contenidos Programáticos Programas de Pregrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	5 de 4

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. "Quantum Chemistry". John P. Lowe. Academic Press. 1993.
2. "Introduction to Quantum Mechanics". David J. Griffiths. Prentice Hall. 1994.
3. "Molecular Quantum Mechanics". P.W. Atkins, R.S. Friedman. Oxford University Press. 1997.
4. "Modern Quantum Chemistry. Introduction to advanced electronic structure theory". Attila Szabo, Neil S. Ostlund. Dover. 1996.
5. "Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles". Robert Eisenberg, Robert Resnick. Wiley. 1985.
6. P.A. Cox, Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure. Oxford Chemistry Primers 37, Ed. Oxford University Press, 1996.
7. R.A. Alberty, Physical Chemistry, Ed. Wiley, 1992. o 3. I.N. Levine, Fisicoquímica, Ed. Mc Graw-Hill, 1996 (4a edición).
8. G.M. Barrow, Química Física, Ed. Reverté, 1985.
9. W.J. Moore, Química Física, Ed. Urmo, 1978.
10. P. N. Atkins, Fisicoquímica. Addison-Wesley, 1986.
11. R. S. Berry, S. A. Rice and J. Ross, Physical Chemistry, Ed. John Wiley and Sons, 1980.
12. J. Bertran et al, Química Cuántica. Ed. Síntesis, 2000.
13. M. Karplus and R. Porter, Atoms and Molecules, Ed. Benjamin, 1970.
14. H. Hanna, Mecánica Cuántica para Químicos. Ed. Fondo Educativo Interamericano 1969.

DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO

1. <https://www.sciencedirect.com/>
2. <http://www.nationalacademies.org>
3. https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_chemistry

NOTA: EN CADA UNA DE LAS UNIDADES EL DOCENTE DEBERA PROPONER MÍNIMO UNA LECTURA EN LENGUA INGLESA Y SU MECANISMO DE CONTROL

	Contenidos Programáticos Programas de Pregrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	6 de 4

UNIDAD No.1						
NOMBRE DE LA UNIDAD: TEORÍA CUÁNTICA: INTRODUCCIÓN Y PRINCIPIOS						
COMPETENCIAS A DESARROLLAR						
CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Orígenes de la mecánica cuántica. Dinámica de sistemas microscópicos. Principios de la mecánica cuántica. Postulados de la mecánica cuántica	Exposición de los temas propuestos. Proposición de lecturas sobre los temas a desarrollar en clase. Desarrollo de ejercicios que permitan al estudiante apropiarse de los conceptos. Utilización del internet como recurso básico en la clase.	8	Lecturas propuestas por el profesor. Desarrollo de los ejercicios y talleres tanto en clase como fuera de ella. Desarrollo de actividades en las páginas web de apoyo al curso	16	2	Realización de evaluaciones cortas o quices sobre las lecturas propuestas. Entrega escrita de los ejercicios y talleres propuestos

	Contenidos Programáticos Programas de Pregrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	7 de 4

UNIDAD No.2

NOMBRE DE LA UNIDAD 2: TEORÍA CUÁNTICA: TÉCNICAS Y APLICACIONES

COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
<p>Movimiento de traslación.</p> <p>Movimiento de vibración.</p> <p>Movimiento de rotación.</p> <p>Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno</p>	<p>Exposición de los temas propuestos.</p> <p>Proposición de lecturas sobre los temas a desarrollar en clase.</p> <p>Desarrollo de ejercicios que permitan al estudiante apropiarse de los conceptos.</p> <p>Utilización del internet como recurso básico en la clase.</p>	8	<p>Lecturas propuestas por el profesor.</p> <p>Desarrollo de los ejercicios y talleres tanto en clase como fuera de ella.</p> <p>Desarrollo de actividades en las páginas web de apoyo al curso</p>	16	2	<p>Realización de evaluaciones cortas o quices sobre las lecturas propuestas.</p> <p>Entrega escrita de los ejercicios y talleres propuestos</p>

	Contenidos Programáticos Programas de Pregrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	8 de 4

UNIDAD No.3

NOMBRE DE LA UNIDAD: ESTRUCTURA ATÓMICA Y ESPECTROS ATÓMICOS

COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
<p>Estructura y espectros de los átomos hidrogenoides.</p> <p>Estructura de átomos multielectrónicos.</p> <p>Espectros de átomos complejos</p>	<p>Exposición de los temas propuestos.</p> <p>Proposición de lecturas sobre los temas a desarrollar en clase.</p> <p>Desarrollo de ejercicios que permitan al estudiante apropiarse de los conceptos.</p> <p>Utilización del internet como recurso básico en la clase.</p>	8	<p>Lecturas propuestas por el profesor.</p> <p>Desarrollo de los ejercicios y talleres tanto en clase como fuera de ella.</p> <p>Desarrollo de actividades en las páginas web de apoyo al curso</p>	16	2	<p>Realización de evaluaciones cortas o quices sobre las lecturas propuestas.</p> <p>Entrega escrita de los ejercicios y talleres propuestos</p>

UNIDAD No.4

NOMBRE DE LA UNIDAD: ESTRUCTURA MOLECULAR

COMPETENCIAS A DESARROLLAR

	Contenidos Programáticos Programas de Pregrado	Código	FGA-23 v.03
		Página	9 de 4

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
<p>Aproximación de Born-Oppenheimer.</p> <p>Teoría de orbitales moleculares.</p> <p>Orbitales moleculares para sistemas poliatómicos.</p> <p>Aplicación a la teoría de orbitales moleculares y a la espectroscopia</p>	<p>Exposición de los temas propuestos.</p> <p>Proposición de lecturas sobre los temas a desarrollar en clase.</p> <p>Desarrollo de ejercicios que permitan al estudiante apropiarse de los conceptos.</p> <p>Utilización del internet como recurso básico en la clase.</p>	8	<p>Lecturas propuestas por el profesor.</p> <p>Desarrollo de los ejercicios y talleres tanto en clase como fuera de ella.</p> <p>Desarrollo de actividades en las páginas web de apoyo al curso</p>	16	2	<p>Realización de evaluaciones cortas o quices sobre las lecturas propuestas.</p> <p>Entrega escrita de los ejercicios y talleres propuestos</p>