

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	1 de 4

**FACULTAD:** CIENCIAS BASICAS

**PROGRAMA:** QUIMICA

**DEPARTAMENTO DE:** QUIMICA

**CURSO:** FISICOQUIMICA III    **CÓDIGO:** 156226

**ÁREA:** FISICOQUIMICA

**REQUISITOS:** 156225 –    **CORREQUISITO:**

**CRÉDITOS:** 4    **TIPO DE CURSO:** TEORICO

**FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN** 1 de mayo de 2021

#### JUSTIFICACIÓN

El papel cada vez más importante de la química cuántica y termodinámica estadística hace que en la formación de nuestros estudiantes del programa de Química (y en general de todas las aéreas de la química) se crean espacios como esta asignatura en la cual se comprenden en detalle los métodos modernos del cálculo de estructuras electrónicas y moleculares, ensambles termodinámicos y funciones de partición, proporcionando al estudiante un conocimiento solido 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 y la termodinámica estadística 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.

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	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
Dinámica de sistemas microscópicos	2	4
Principios de la mecánica cuántica	2	4
Postulados de la mecánica cuántica	2	4
Movimiento de traslación	2	4
Movimiento de vibración	2	4
Movimiento de rotación	2	4
Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno	2	4
Estructura y espectros de los átomos Hidrogenoides	2	4
Estructura de átomos Multielectrónicos	2	4
Espectros de átomos complejos	2	4
Aproximación de Born-Oppenheimer	2	4
Teoría de orbitales moleculares	2	4
Orbitales moleculares para sistemas Poliatómicos	2	4
Aplicación a la teoría de orbitales moleculares y a la espectroscopia	2	4
Definición estadística de entropía	2	4
La distribución de estados Energéticos	2	4

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	3 de 4

La energía interna y la entropía	2	4
Ensamblajes termodinámicos	2	4
Relaciones fundamentales	2	4
Uso de la termodinámica estadística	2	4
<b>TOTAL</b>	<b>64</b>	<b>128</b>

**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**

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	4 de 4

1. Ira N. Levine. Química Cuántica 5 Edición. Ed Prentice Hall. (B. Central: 541.28/L665q).
2. Atkins P.W., Physical Chemistry, 6th Edition, Oxford U.P., Oxford, 2002. (B. Central: 539/A873p).
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).

### 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](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

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	5 de 4

<b>UNIDAD No.1</b>						
<b>NOMBRE DE LA UNIDAD : TEORÍA CUÁNTICA: INTRODUCCIÓN Y PRINCIPIOS</b>						
<b>COMPETENCIAS A DESARROLLAR</b>						
<b>CONTENIDOS</b>	<b>ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR</b>	<b>HORAS CONTA CTO DIRECTO</b>	<b>ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE</b>	<b>HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE</b>	<b>HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE</b>	<b>ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE</b>
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

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	6 de 4

## UNIDAD No.2

### NOMBRE DE LA UNIDAD : 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
Movimiento de traslación.  Movimiento de vibración.  Movimiento de rotación.  Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno	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

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	7 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

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	8 de 4

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTAC TO DIRECT O	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>Aproximació n 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>

#### UNIDAD No.5

**NOMBRE DE LA UNIDAD : TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA: CONCEPTOS**

#### COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTAC TO DIRECT O	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
------------	---	--------------------------	---	-----------------------------	---	---

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	9 de 4

<p>Definición estadística de entropía.</p> <p>La distribución de estados energéticos.</p> <p>La energía interna y la entropía.</p> <p>Ensamblajes termodinámicos</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>
--	--	---	---	----	---	--

<b>UNIDAD No.6</b>						
<b>NOMBRE DE LA UNIDAD : TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA: RELACIONES FUNDAMENTALES</b>						
<b>COMPETENCIAS A DESARROLLAR</b>						
<b>CONTENIDOS</b>	<b>ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR</b>	<b>HORAS CONTADO DIRECTO</b>	<b>ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE</b>	<b>HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE</b>	<b>HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE</b>	<b>ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE</b>

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	10 de 4

<p>Relaciones fundamentales.</p> <p>Uso de la termodinámica estadística</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>
---	--	---	---	----	---	--