

	FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO			
	CODIGO: FO-M-DC- 05-01	VERSION: 2	FECHA: 2010-04-19	PAGINA: 1 de 4

1. IDENTIFICACIÓN				
Nombre de la Asignatura Química cuántica		Código 7806051		Área Profesionaliza- ción
Naturaleza Teórica	No de Créditos 3	TP 80	TD 0	TI 64
Semestre VI	Duración 144	Habilitable Si	Homologable Si	Validable Si
<p>PRE-REQUISITO: Ninguno</p> <p>Se recomienda que antes de ver esta materia el estudiante haya visto todas las asignaturas de matemáticas, estadística y física del área básica, y el curso de átomos, moléculas y enlaces</p>				
2. JUSTIFICACIÓN				
<p>La formación del Químico, considerando las diferentes ramas de estudio de la química debe estar orientada a generar una serie de capacidades académicas enmarcadas dentro de cada una de ellas.</p> <p>En esta asignatura se pretende proporcionar los fundamentos necesarios para comprender la intrincada naturaleza del átomo, para poder visualizar el contexto bajo el cual nació la teoría cuántica y para relacionar las teorías y modelos estudiados con los fenómenos químicos que se observan en la naturaleza.</p>				
3. COMPETENCIAS				
3.1 Competencia General				
✓ Interpretar el comportamiento micro y macroscópico de los sistemas químicos mediante el uso de teorías y modelos matemáticos, físicos y químicos para explicar y predecir sus propiedades.				
3.2 Competencias Específicas				
✓ Comprender y describir los fenómenos que dieron lugar al nacimiento de la mecánica cuántica.				
✓ Entender cómo se resuelve la ecuación de Schrödinger para diferentes sistemas.				
4. OBJETIVO				
Que el alumno sea capaz de comprender los conceptos básicos de la mecánica cuántica y aplicarlos en la descripción de átomos y moléculas.				
5. CONTENIDO TEMÁTICO Y ANÁLISIS DE CRÉDITOS				
<p>UNIDAD I: Nacimiento de la teoría cuántica</p> <ul style="list-style-type: none"> • Repaso de algunos conceptos matemáticos y físicos (derivada, integral, números complejos, probabilidad, fuerza electrostática, fuerza 				

	FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO			
	CODIGO: FO-M-DC- 05-01	VERSION: 2	FECHA: 2010-04-19	PAGINA: 2 de 4

magnética, energía cinética y potencial, potencial electrostático, análisis dimensional)

- Radiación del cuerpo negro y la ecuación de Planck
- El efecto fotoeléctrico
- El espectro de emisión y absorción del átomo de hidrógeno
- La fórmula de Rydberg
- El modelo de Bohr
- La hipótesis de de Broglie y la observación de ondas de materia
- El principio de incertidumbre de Heisenberg

UNIDAD II: Postulados de la teoría cuántica

- Primer postulado
- Segundo postulado
- Tercer postulado
- Cuarto postulado
- Funciones, Funcionales y Operadores (propiedades)

• UNIDAD III: Sistemas modelo

- Partícula en una caja unidimensional (Descripción, Planteamiento, Solución, función de onda, densidad de probabilidad, niveles energéticos, espectro de líneas, valor esperado de operadores, relación de incertidumbre)
- Movimiento traslacional: Partícula en una caja tridimensional
- Dos y más partículas en una caja
- Movimiento rotacional: Rotor rígido cuántico
- Movimiento vibracional: Oscilador armónico cuántico

• UNIDAD IV: El átomo de hidrógeno

- Descripción del sistema y planteamiento del problema
- La solución al problema (función de onda, densidad de probabilidad, niveles energéticos, espectro de líneas, valor esperado de operadores)
- Los orbitales: parte radial y parte angular

• UNIDAD V: El espín electrónico

- El experimento de Stern y Gerlach
- Estados y Operadores de espín
- Bosones y fermiones
- El espín electrónico y el principio de antisimetría

UNIDAD VI: Átomos polielectrónicos

- El sistema Helio: aproximación del electrón libre
- Átomos polielectrónicos con el método del electrón libre (formulación general)
- Teorema variacional y métodos variacionales

**FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO****CODIGO:**
FO-M-DC-
05-01**VERSION:**
2**FECHA:**
2010-04-19**PAGINA:**
3 de 4

- Funciones Polielectrónicas Antisimétricas
- El método de Hartree-Fock

UNIDAD VII: Moléculas

- La Aproximación de Born Oppenheimer
- La Ecuación Electrónica Molecular
- El catión molecular de hidrógeno
- Orbitales enlazantes y antienlazantes
- Superficies de energía potencial y funciones de onda nuclear

UNIDAD VIII: Introducción a la química cuántica computacional

- Cálculo de punto sencillo
- Optimización de geometría
- Orbitales moleculares para moléculas diatómicas
- Cálculo del cambio de energía de una reacción

TEMAS	TP	TD	TI
UNIDAD 1	5	0	4
UNIDAD 2	5	0	4
UNIDAD 3	15	0	12
UNIDAD 4	15	0	12
UNIDAD 5	5	0	4
UNIDAD 6	15	0	12
UNIDAD 7	10	0	8
UNIDAD 8	10	0	8
TOTAL DE HORAS DEL CURSO	80	0	64
TOTAL CRÉDITOS:	3		

6. Estrategias Metodológicas***Trabajo presencial:***

El contenido de la asignatura será presentado a manera de exposición por parte del docente y contará con la participación activa de los estudiantes en clase.

Trabajo dirigido:

El contenido de la asignatura será reforzado con análisis de documentos y ejercicios que permiten una mejor comprensión de los temas.

Trabajo independiente:

Continuamente se estarán asignando lecturas y ejercicios sobre los temas vistos en clase.

	FORMATO PROPUESTA DE DESARROLLO PROGRAMA DE CURSO			
	CODIGO: FO-M-DC- 05-01	VERSION: 2	FECHA: 2010-04-19	PAGINA: 4 de 4

7. RECURSOS.

Se hará uso del material normal del aula de clase, uso de salas de informática, libros y medios audiovisuales disponibles.

8. EVALUACIÓN

En los diferentes tipos de evaluación se tendrá en cuenta la competencia comunicativa, matemática, argumentativa, propositiva e interpretativa, la capacidad para el trabajo en equipo y el manejo de un segundo idioma.

La evaluación se realizará mediante los siguientes instrumentos de evaluación: exposición, quices, ejercicios, talleres, y exámenes parciales.

9. BIBLIOGRAFÍA

- Fuentes Electrónicas
- Pauling, L.; Wilson, E. B.; Introduction to Quantum Mechanics: with Applications to Chemistry; McGraw-Hill, New York, USA. 1935.
- Cruz-Garriz, D.; Chamizo, J. A.; Garriz, A; Estructura atómica: Un enfoque químico; Addison-Wesley Iberoamericana: Wilmington, DE, USA. 1991
- Atkins, J. De Paula, Química Física, 8va edición, Editorial Panamericana. 2008
- Levine, I.N. Fisicoquímica, 5ta edición, McGraw-Hill, 2004
- McQuarrie, D. A.; Simon, J. D.; Physical Chemistry: A Molecular Approach. University Science Books: Sausalito, CA, USA; 1997.
- Levine, I. N.; Química cuántica; Pearson education S. A.: Madrid. Quinta edición, 2001