1. **INFORMACIÓN GENERAL DEL CURSO**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Facultad** | Ciencias Básicas | **Fecha de Actualización** | 23/03/17 |
| **Programa** | Química | **Semestre** | 7 |
| **Nombre**  | Química Cuántica | **Código** | 23415 |
| **Prerrequisitos** | Ecuaciones diferenciales | **Créditos** | 4 |
| **Nivel de Formación** | Técnico  |  | Profesional  | X | Maestría  |  |
| Tecnológico |  | Especialización  |  | Doctorado  |  |
| **Área de Formación**  | Básica |  | Profesional o Disciplinar | X | Electiva |  |
| **Tipo de Curso** | Teórico |  | Práctico |  | Teórico-práctico | X |
| **Modalidad** | Presencial | X | Virtual |  | Mixta |  |
| **Horas de Acompañamiento Directo** | Presencial | 6 | Virtual |  | **Horas de Trabajo Independiente** |  |

1. **DESCRIPCIÓN DEL CURSO**

|  |
| --- |
| El contenido de la asignatura complementa la formación teórica de los estudiantes, brindando los fundamentos físicos que describen el comportamiento de la materia a escala atómica y molecular, de la misma manera analiza elementos de mecánica cuántica y su aplicación a la química. |

1. **JUSTIFICACIÓN DEL CURSO**

|  |
| --- |
| La química cuántica es una disciplina que brinda las herramientas necesarias para ser empleadas como soporte en la comprensión a nivel atómico y molecular de los procesos químicos. |

1. **PRÓPOSITO GENERAL DEL CURSO**

|  |
| --- |
| Desarrollar formas de pensamiento lógico y capacidad de razonamiento, de modo que adquieran habilidades para la resolución de problemas químicos, empleando los conceptos y principios de la mecánica cuántica |

1. **COMPETENCIA GENERAL DEL CURSO**

|  |
| --- |
| Comprender el fundamento teórico así como las herramientas matemáticas necesarias para el estudio cuántico de átomos y moléculas. |
| \* Aprender los fundamentos de la teoría cuántica moderna y su aplicación a problemas sencillos. |
| \* Resolver problemas prácticos donde las distintas aproximaciones puedan dar respuestas útiles. |

**6. PLANEACIÓN DE LAS UNIDADES DE FORMACIÓN**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 1.** | CRISIS DE LA FÍSICA Y NACIMIENTO DE LA TEORÍA CUÁNTICA | **COMPETENCIA** | Reconstruir el significado de la estructura atómica a partir del análisis de los trabajos de investigación desarrollados a finales del siglo XIX y primer cuarto del XX |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| 1.1 Surgimiento de los modelos de estructura atómica. | Esta unidad se desarrolla mediante lecturas de artículos específicos sobre el descubrimiento de partículas elementales, realización de laboratorios virtuales , discusión de experimentos que dieron origen a la teoría cuántica y además la realización de talleres resueltos por el docente con participación activa de los estudiantes. | \* Explica elde los modelos atómicos de Thomson y Rutherford a partir del descubrimiento del electrón y núcleo respectivamente.\* Reconoce que la física clásica falla al tratar de explicar fenómenos como la radiación del cuerpo negro entre otros.\* Entiende las reglas de la cuantización en el átomo de Bohr\* Explica la naturaleza dual del electrón\* Explica que el proceso de medida simultánea de ciertas propiedades conduce necesariamente una indeterminación. | Se evaluará el desempeño de los estudiantes a partir del cumplimiento de los compromisos tales como talleres, individuales y grupales, análisis y discusión de material bibliográfico. Esta unidad se evaluará para el primer parcial. | 1 |
| 1.2 Emisión y absorción de la radiación (clásicamente) | 1 |
| 1.3 Radiación térmica. | 1 |
| 1.4 Naturaleza de la luz y espectros atómicos. | 1 |
| 2 |
| 1.5 Experimentos cruciales en el nacimiento de la teoría cuántica. |
| 1.6 Átomo de Niels Bohr. | 2 |
| 1.7 Dualidad onda-partícula. | 2 |
| 1.8 Principio de indeterminación | 2 |
| Práctica 1. Clase Introductoria | 2 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 2.** | DESARROLLO DE LA TEORÍA CUÁNTICA MODERNA | **COMPETENCIA** | Emplear el formalismo matemático empleado por Schrödinger en la resolución de problemas de interés químico. |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| 2.1 Operadores | Esta unidad se desarrolla mediante lecturas dirigidas, resolución de ejercicios modelos orientados por el docente y tomando en cuenta los puntos de vista expresados por los estudiantes, previa discusión, así como la realización de talleres que permitan al estudiante emplear los elementos matemáticos de la teoría cuántica, necesarios para su solución. | Explica el concepto de operador así como su algebra.Resuelve ecuaciones que involucran eigenfunciones, eigenestados y eigenvalores.Establece las condiciones que deben cumplir las funciones de onda para ser aceptables.Explica los postulados de la mecánica cuántica.Emplea los postulados de la mecánica cuántica y la ecuación de Schrödinger para resolver problemas de partículas en cajas.Comprende la influencia de la simetría en la degeneración de los estados.Resuelve la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico. | Para esta unidad se propone tener en cuenta el cumplimiento de los compromisos tales como talleres y lecturas, además como el estudiante identifica, como comprende, reconoce y aborda la solución de problemas de interés químico empleando la ecuación de Schrödinger.Esta unidad se evaluará para el primer parcial. | 3 |
| 2.2 Eigenvalores | 3 |
| 2.3 Ecuación de ondas. | 3 |
| 2.4 Funciones de onda | 3 |
| 2.5 Postulados de la teoría cuántica moderna no relativista. | 3 |
| Practica 2. Variables, constantes y funciones en Máxima | 3 |
| 2.6 Caja unidimensional | 4 |
| 2.7 Cajas multidimensionales | 4 |
| 2.8 Degeneración y desdoblamiento de los estados. | 4 |
| 2.9 Efecto túnel | 4 |
| Práctica Nacimiento de la mecánica cuántica | 4 |
| 2.10 Oscilador armónico | 5 |
| Practica 3. Derivación, integración y solución de ecuaciones diferenciales | 5 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 3.** | EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO EN LA TEORÍA CUÁNTICA MODERNA | **COMPETENCIA** | Resolver problemas para la ecuación de Schrödinger donde haga cambios de coordenadas y separación de variables, cuya solución parcial permite describir el átomo en termino de tres números cuánticos |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| 3.1 Partícula en circunferencia de potencial. | Esta unidad se desarrolla mediante la lectura de guías sobre átomo de hidrógeno y espín electrónico, además resolución de problemas de tipo modelo donde haga cambios de coordenadas y separación de variables. | Obtiene los valores propios de la energía para una partícula en un potencial esféricoObtiene valores propios de la energía para átomos tipo hidrogenoide.Comprende la solución de la ecuación de Schrödinger para este sistema en término de los números cuánticosDescribe las consecuencias de la aplicación de un campo magnético sobre los estados degenerados de un sistemaConcluye que el espín es una propiedad del electrón producto de su momento magnético interno. | Se evaluará el desempeño de los estudiantes a partir del cumplimiento de los compromisos tales como talleres, individuales, análisis y discusión de material bibliográfico. | 6 |
| Práctica 4. Particula en una caja | 6 |
| 3.2 Resolución de la ecuación de Schrödinger al problema del átomo de hidrógeno. | 7 |
| 3.3 Interpretación de las soluciones para el átomo de hidrógeno. | 7 |
| Práctica 5. Oscilador armónico | 7 |
| 3.4 Efecto Zeeman y efecto Zeeman anómalo | 8 |
| 3.5 Experimento Sterm-Gerlach | 8 |
| 3.6 Espín electrónico | 8 |
| Práctica 6. Partícula en un potencial esférico | 8 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 4.** | MÉTODOS APROXIMADOS | **COMPETENCIA** | Emplear los fundamentos de diferentes herramientas de cálculo que permiten |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| 4.1 Método variacional | Esta unidad se desarrolla mediante seminarios-talleres donde se resuelvan problemas de tipo modelo que permitan visualizar como el empleo de distintos métodos permite corregir el valor de la energía de un sistema a valores cada vez más cercanos a los experimentales | \* Demuestra manejo conceptual del teorema variacional.\* Emplea el método variacional y la teoría de las perturbaciones a sistemas de partículas en cajas.\* Discrimina diferentes métodos de cálculo empleados para estimar la energía de sistemas atómicos reales a partir de sus fundamentos teóricos | Se evaluará el desempeño de los estudiantes en la medida en que se cumpla con los seminarios-talleres además de tener en cuenta como el estudiante identifica, comprende, reconoce y plantea soluciones de problemas empleando distintas herramientas de cálculo.Esta unidad se evaluará para el examen final. | 9 |
| Práctica 7 Partícula en un potencial esférico | 9 |
| 4.2Teoría de las perturbaciones independientes y dependientes del tiempo. | 10 |
| 4.3 Interacción radiación materia. | 11 |
| Práctica 8 Átomo de hidrógeno | 11 |
| 4.4 Método de campo autoconsistente. | 12 |
| 4.5 Método Hartree. | 12 |
| 4.6 Método Hartree-Fock | 12 |
| 4.7 Método del electrón libre | 12 |
| Práctica 9 Método variacional | 12 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UNIDAD 5.** | ÁTOMOS POLI ELECTRÓNICOS Y MOLÉCULAS | **COMPETENCIA** | Emplear el formalismo matemático empleado por la química cuántica en la descripción de sistemas poliectrónicos y sistemas moleculares. |
| **CONTENIDOS** | **ESTRATEGIA DIDÁCTICA** | **INDICADORES DE LOGROS** | **CRITERIOS DE EVALUACIÓN** | **SEMANA** |
| 5.1 Atomo de Helio. | Esta unidad se desarrolla mediante seminarios- talleres donde se resuelvan problemas de tipo modelo que permitan visualizar como el empleo de distintas aproximaciones y métodos que permiten describir sistemas polielectrónicos y moleculares. | \* Emplea los fundamentos conceptuales que permiten la descripción de átomos polielectrónicos.\* Aplica el método CLOA para encontrar las funciones de onda de sistemas moleculares.\* Calcula parámetros de moléculas a sistemas π conjugados empleando el método de Huckel. | Se evaluará el desempeño de los estudiantes en la medida en que se cumpla con los seminarios-talleres además de tener en cuenta como el estudiante plantea soluciones de problemas empleando las aproximaciones y métodos necesarios para abordar este tipo de sistemas. | 13 |
| 5.2 Aproximación Born-Oppenheimer. | 13 |
| 5.3 Método CLOA. | 13 |
| 5.4 Moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares. | 14 |
| Práctica 10 Método de Perturbaciones | 14 |
| 5.5 Moléculas poliatómicas. | 15 |
| Práctica 11 Método de Hartree-Fock | 15 |
| 5.6 Enlace de valencia. | 16 |
| 5.7 Sistemas π conjugados y el método de Huckel | 16 |
| Práctica 12 Método de Huckel | 16 |

1. **BIBLIOGRAFÍA BÁSICA DEL CURSO**

|  |
| --- |
| **Ira N Levine, Química Cuántica (5th ed). Ed Prentice Hall** |
| **Atkins, P.W.; Friedman, R.S.; Molecular Quantum Mechanics 4th ed., Oxford University Press, 2005.** |
| **Thomas Engel y Warren Hehre. Quantum Chemistry &Spectroscopy, 2011** |
|  |

1. **BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA DEL CURSO**

|  |
| --- |
|  |
|  |
|  |
|  |