

	<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:**  **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) 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 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.

### COMPETENCIAS

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

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	2 de 4

### 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
<b>TOTAL</b>	<b>16</b>	<b>32</b>

### UNIDAD 2 TEORÍA CUÁNTICA: TECNICAS Y APLICACIONES

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

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

### UNIDAD 3 ESTRUCTURA ATOMICA Y ESPECTRO ATOMICO

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

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

Estructura de átomos Multieletrónicos	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
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>

#### UNIDAD 4 ESTRUCTURA MOLECULAR

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

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

Estructura de átomos Multieletrónicos	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
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 presenciales y como apoyo algunas sesiones virtuales 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
- Presentación de charlas magistrales de los aspectos teóricos de cada tema, las cuales, incluyen ejercicios y debates temáticos.
- Emplear softwares en línea y de acceso libre para visualizar molecular y estructuras sólidas.
- Desarrollo de talleres que permitan entender los conceptos y aplicaciones de cada tema, realizando fortalecimiento y seguimiento en las horas de asesoría.
- Usar recursos electrónicos para visualizar estructuras, planos y propiedades de estructuras cuánticas.
- Lectura de artículos en inglés y español para conocer las aplicaciones de lo visto en clase.

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

## 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.

Los resultados de aprendizaje establecidos por el Programa de Química son:

**RAP1.** Desarrollar procesos de comunicación efectiva y asertiva de resultados mediante informes orales, escritos y/o electrónicos respetando los derechos de autor. Este se evalúa mediante la presentación de informes de investigación, exposiciones de artículos científicos o un tema específico y ensayos.

**RAP2.** Presentar informes técnico-científicos de laboratorio demostrando el cumplimiento de la normatividad ambiental, los estándares de calidad en los procedimientos y las medidas asociadas a ellos, riesgos profesionales, éticos y trabajo en grupo. Este se evalúa mediante el desempeño durante la realización de las prácticas de laboratorio, presentación de preinformes y diagramas de flujo previos, los informes escritos de los mismos y presentación de los proyectos de aula.

**RAP3.** Desarrollar metodologías de transferencia de conceptos y/o datos para la solución de problemas en el área de las ciencias naturales. Evaluado por medio de la utilización e implementación de software especializados, procesamiento, análisis e interpretación de datos en pruebas escritas.

De acuerdo a la naturaleza de la asignatura, esta esta enfocada principalmente en el desarrollo del RAP1 Y RAP3.

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

1. Ira N. Levine. Química Cuántica 5 Edición. Ed Prentice Hall. (B. Central: 541.28/L665q).
2. Atkins P.W., Physical Chemistry, 8th Edition, Oxford U.P., Oxford, 2006. (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).

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	7 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](https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_chemistry)

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

**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

**UNIDAD No.2**

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

**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

**UNIDAD No.3**

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

**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>	11 de 4

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTADO 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>

#### UNIDAD No.5

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

#### COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTADO 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
------------	---	-----------------------	---	-----------------------------	---	---

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	12 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>						
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

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	13 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>
---	--	---	---	----	---	--