

	FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES DEPARTAMENTO DE QUIMICA PROGRAMACIÓN CURRICULAR DE ASIGNATURAS	Código: DQI-FOA-FR-03
		Página: 1 de 3
		Versión: 1
		Vigente a partir de: 2014-02-12

1. IDENTIFICACIÓN DE LA ASIGNATURA:

NOMBRE: QUÍMICA CUÁNTICA		SEMESTRE: V	CÓDIGO ASIGNATURA: 3261
NO DE CRÉDITOS: 3	INTENSIDAD HORARIA: 3 T	CICLO: PROFESIONALIZACIÓN	
TIPO: TEÓRICO (X)	PRERREQUISITOS: 8848 ESTRUCTURA ATÓMICA 118 CÁLCULO III 6740 FÍSICA III 109 ALGEBRA LINEAL		

2. DESCRIPCIÓN DE LA ASIGNATURA:

La fisicoquímica establece los principios que gobiernan el comportamiento de los sistemas químicos tanto a nivel macroscópico como a nivel microscópico. Para ello hace uso de las herramientas matemáticas requeridas y de algunas aproximaciones físicas relevantes. A diferencia del curso de *Fisicoquímica I* y gran parte del curso de *Fisicoquímica II* en donde se estudian procesos de interés químico a nivel macroscópico, en los cursos de *Estructura Atómica* y *Química Cuántica* se aborda la descripción de átomos y moléculas a nivel microscópico usando la teoría cuántica. Haciendo uso del formalismo matemático abordado en el curso de *Estructura Atómica* en donde se trataron sistemas atómicos, en el curso de *Química Cuántica* se aplica dicho formalismo al tratamiento de sistemas moleculares. Aparte del tratamiento de la estructura electrónica de sistemas moleculares, también se abordará el problema de la simetría molecular haciendo uso de la teoría de grupos. Finalmente se abordará de manera introductoria la descripción teórica de la espectroscopia atómica y molecular.

3. OBJETIVOS:

Objetivo General:

Entender las leyes que gobiernan el comportamiento de sistemas moleculares y derivar resultados que permitan el entendimiento del comportamiento de sistemas químicos.

Objetivos Específicos:

- Aplicar el formalismo de la mecánica cuántica a sistemas moleculares.
- Hacer uso del concepto del orbital atómico para describir orbitales moleculares.
- Entender las aproximaciones físicas que deben realizarse al tratar la estructura electrónica molecular.
- Para una molécula dada, deducir el grupo de simetría al cual pertenece y la tabla de caracteres asociada a dicho grupo.
- Entender el origen microscópico de las diversas señales que se observan experimentalmente al hacer espectroscopia.

	<p>FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES DEPARTAMENTO DE QUIMICA</p> <p>PROGRAMACIÓN CURRICULAR DE ASIGNATURAS</p>	Código: DQI-FOA-FR-03
		Página: 2 de 3
		Versión: 1
		Vigente a partir de: 2014-02-12

4. CONTENIDO PROGRAMÁTICO:

1. ROTACIONES MOLECULARES. Repaso del rotor rígido de dos partículas; Rotaciones moleculares
2. EL OSCILADOR ARMÓNICO Y VIBRACIONES MOLECULARES. Descripción clásica; El oscilador armónico unidimensional; Vibración de moléculas; Modos normales
3. ESTRUCTURA ELECTRÓNICA MOLECULAR. La aproximación de Born-Oppenheimer; El ión de la molécula de hidrógeno; El método del campo autoconsistente para moléculas; Interacción de configuraciones
4. TEOREMAS DEL VIRIAL Y DE HELLMANN-FEYNMAN. Teorema del virial; Teorema de Hellmann-Feynman; Teorema electrostático
5. TRATAMIENTOS APROXIMADOS PARA SISTEMAS MOLECULARES. Teoría del Orbital Molecular; Teoría del Enlace de Valencia; Método de Hückel
6. TEORIA DE GRUPOS Y SIMETRÍA MOLECULAR. Definiciones y teoremas de la teoría de grupos; Simetría molecular y grupos de simetría; Representaciones de los grupos; Teoría de Grupos y teoría cuántica; Combinaciones lineales adaptadas a la simetría
7. INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA. Radiación electromagnética; Interacción de la radiación con la materia; Forma y anchura de las líneas espectrales; Espectroscopía electrónica; Resonancia magnética nuclear

5. INTENSIDAD HORARIA:

INTENSIDAD SEMESTRAL HORARIA POR ESTRATEGIAS PEDAGÓGICAS						
HORAS CON ACOMPAÑAMIENTO DOCENTE				HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE		
Teoría	Laboratorio	*Actividades complementarias	Evaluación	Preparación de exámenes	Informes de laboratorio.	Actividades complementarias
TOTAL CON ACOMPAÑAMIENTO: 54				TOTAL TRABAJO INDEPENDIENTE: 81		

* Actividades Complementarias: Talleres, consultas, exposiciones, quices, seminarios, preparación de prácticas de laboratorio, tabulación y análisis de resultados, etc.

6. COMPETENCIAS:

 Universidad de Nariño	FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES DEPARTAMENTO DE QUIMICA PROGRAMACIÓN CURRICULAR DE ASIGNATURAS	Código: DQI-FOA-FR-03
		Página: 3 de 3
		Versión: 1
		Vigente a partir de: 2014-02-12

Al finalizar el curso, el estudiante estará en la capacidad de:

- Aplicar el formalismo de la mecánica cuántica a sistemas moleculares para predecir sus propiedades.
- Aplicar las aproximaciones necesarias para resolver problemas de química cuántica molecular y reconocer las consecuencias físicas de los resultados obtenidos.
- Usar el concepto de orbital atómico como punto de partida para la descripción de orbitales moleculares.
- Predecir el grupo de simetría al cual pertenece una molécula.
- Usar modelos simples que permitan entender el comportamiento espectroscópico molecular.
- Predecir transiciones permitidas a partir de las propiedades de simetría de una molécula.

7. CRITERIOS DE EVALUACIÓN:

Teniendo en cuenta los objetivos planteados en la asignatura y conforme con lo establecido en el Estatuto Estudiantil de la Universidad de Nariño; se concertara la evaluación académica en sus aspectos fundamentales con los estudiantes y se registrará en el programa de la asignatura el primer día de clases.

8. BIBLIOGRAFÍA:

- LEVINE, I. N. Química Cuántica, 5 Ed. McGraw-Hill, 2001.
- CRUZ-GARRITZ, D.; CHAMIZO, J. A.; GARRITZ, A. Estructura Atómica: Un enfoque Químico. Addison-Wesley, 1987.
- COTTON, F. A. Chemical Applications of Group Theory, 3rd ed. Wiley, 1990.
- REQUENA, A.; ZUÑIGA, J. Espectroscopía. Pearson Educación, 2004.
- CUEVAS, G.; CORTES, F. Introduccion a la Química Computacional. Fondo de Cultura Económica, 2003.
- LIBOFF, R. L. Introductory Quantum Mechanics. Addison-Wesley, 1980.
- GRIFFITHS, D. J. Introduction to Quantum Mechanics, 2nd Ed. Pearson Education, 2005.
- EISBERG, R.; RESNICK, R. Física Cuántica. Editorial Limusa, 1979.
- ATKINS, P.W. Química Física, 6 Ed. Ediciones Omega, 1999.