



UNIVERSIDAD DE CORDOBA

CÓDIGO:
FDOC-088
VERSIÓN: 01
EMISIÓN:
22/02/2019
PÁGINA
1 DE 8

PLAN DE CURSO

1. INFORMACIÓN BÁSICA

1.1. Facultad	Ciencias Básicas	1.2. Programa	Química		
1.3. Área	Química	1.4. Curso	Química Cuántica		
1.5. Código	402143	1.6. Créditos	2		
1.6.1. HDD	4 h/semana	1.6.2. HTI	8 h/semana	1.7. Año de actualización	2020

2. JUSTIFICACIÓN

La mecánica clásica evolucionó a partir de las leyes de Newton. Esta mecánica explicó adecuadamente los resultados experimentales en el macro-mundo. De hecho, coordinó las experiencias de las personas de la época. En la macroescala todavía es adecuada, pero en las escalas atómica y subatómica la mecánica clásica falla por completo: ya no coordina las experiencias de nuestras investigaciones experimentales.

Es decir, en la naturaleza se presentan fenómenos a escala atómica que no se pueden describir satisfactoriamente a través de la física clásica o de una química general, por ello fue necesario formular una nueva teoría que diera cuenta de dichos fenómenos, la cual fue denominada Mecánica Cuántica.

Esta nueva teoría reformula algunos principios y conceptos ya conocidos y plantea otros que han sido trascendentales en el desarrollo de nuevas ramas de la física tales como la atómica y molecular, la nuclear, la del estado sólido, la óptica cuántica, la electrónica cuántica y la química cuántica entre otras. Ramas estas que contribuyen al desarrollo científico-técnico que está transformando a un ritmo sin precedentes, las formas contemporáneas de la vida, la producción y la comunicación.

Teniendo presente que las ciencias básicas no están delimitadas específicamente o no tienen un límite definido, vemos como muchas veces se trabaja en esta parte de las ciencias y "no se sabe" si realmente estamos en química, matemática o física, ya que cada una apoya a la otras; por ello la física clásica y la química general quedan enmarcadas dentro de los parámetros cuánticos, como si fueran un caso especial, es decir, en realidad todo lo que se vive en el mundo físico es cuántico; por ello el físico y el químico deben determinar y caracterizar fenómenos cuánticos por medio de su análisis y experimentación, para diferenciarlos de los clásicos y así poder delimitarlos.

La aplicación de la mecánica cuántica a los problemas de la química constituye la denominada Química Cuántica, su papel se hace cada vez más deseable por los estudiantes de todas las áreas de la química, ya que deben comprender los métodos modernos de cálculo de estructuras electrónicas y moleculares.



La influencia de la química cuántica se manifiesta en todas las ramas de la química, vemos por ejemplo como los químicos físicos usan la mecánica cuántica para los cálculos de propiedades termodinámicas de los gases, para interpretar los espectros moleculares y las fuerzas intermoleculares, para calcular propiedades de los estados de transición de las reacciones químicas y propiedades moleculares teóricamente, así como también estudiar el enlace en los sólidos.

Los químicos orgánicos usan la mecánica cuántica para estimar las estabildades relativas de las moléculas, calcular las propiedades de los intermedios de reacción y analizar los espectros RMN. Los químicos inorgánicos usan esta teoría cuántica para poder explicar las propiedades de los iones complejos de los metales de transición. Cabe destacarse que habitualmente el trabajo de los químicos

analíticos se basa en el uso de los métodos espectroscópicos, por ello para hacer el análisis adecuado de las frecuencias e intensidades de las líneas de un espectro, se debe recurrir a la mecánica cuántica. También se sabe que los bioquímicos realizan estudios mecanocuánticos de conformaciones de moléculas biológicas, de enlaces de enzima-substrato y de solvatación de moléculas biológicas.

En este curso, después de la visión general de la antigua teoría cuántica, precursora de la mecánica cuántica, se presenta un resumen de las ideas de la mecánica cuántica, que se utiliza ampliamente más adelante en este curso. Luego se discute el problema de las partículas en las distintas, el oscilador armonico cuantico y el rotor rigido y su relación con la espectroscopia; para finalmente rematar con el átomo de hidrógeno.

Este curso también sirve de base para otros cursos electivos sobre química teórica, para aquellos estudiantes que decidan seguir por esta línea, no de menos importancia que la química experimental.

Por todo lo anterior es obvio que este curso es fundamental y de carácter obligatorio dentro de la formación de un químico.

3. PROPÓSITOS DE FORMACIÓN

En concordancia con lo dispuesto en el PEP 2017 del programa de Química: El enfoque pedagógico que tiene la Universidad se fundamenta en el aprendizaje, se busca garantizar una formación integral que le permita al estudiante desarrollar las competencias requeridas para desempeñarse en diferentes escenarios con capacidad científica, procedimental, social, ética y humana utilizando metodologías acordes con las nuevas Tecnologías de la Información y Comunicación (TIC) y medios pedagógicos para enseñar, aprender a aprender fomentando el aprendizaje autónomo. Es por ello que la Universidad determinó su propósito de formación en los cuatro pilares de la educación: aprender a: ser, conocer, a hacer y a interactuar.



Por qué estudiar mecánica cuántica?

- Dominar y entender muchos aspectos de la física, la química y la tecnología moderna.
- Continuar desarrollando habilidades en la resolución de problemas y el razonamiento cuantitativo.
- Por curiosidad, ya que hace asaltos tan escandalosos en nuestras formas comunes de pensar sobre el mundo.
- Comprender la naturaleza al nivel más profundo posible.
- Pensar en formas nuevas y desconocidas: desarrollar la intuición para lo contra-intuitivo; Es este tipo de experiencia la que constituye la educación en el sentido más verdadero.
- Llevar nuestras experiencias con partículas atómicas y subatómicas a un sistema lógico.
- Explicar y predecir resultados experimentales del micromundo.
- Apropiarnos de las leyes que gobiernan los átomos y sus partes constituyentes, electrones y núcleos.

4. COMPETENCIAS

4.1. Específicas

En concordancia con el enfoque pedagógico basado en el aprendizaje y con el el Proyecto Tuning el departamento de Química para este curso pueden definirse las siguientes competencias específicas:

- Comprende los principios de la mecánica cuántica y su aplicación para describir la estructura y las propiedades de los átomos y las moléculas.
- Adquiere los conocimientos para aplicar y evaluar la interacción radiación-materia, los postulados de la mecánica cuántica a la química.
- Muestra conocimiento y comprensión de los hechos, conceptos, principios y teorías esenciales asociados con las diferentes áreas de la química.
- Resuelve problemas cualitativos y cuantitativos utilizando modelos desarrollados previamente
- Reconoce y analiza nuevos problemas y planificar estrategias para resolverlos.
- Interpreta, evalúa y sintetiza datos e información química.
- Procesa y calcula datos asociados con información química.



4.2. Transversales

En concordancia con el artículo 12 del acuerdo 147(BIS) de diciembre de 2018: Las competencias transversales en el currículo desarrollan habilidades para la vida personal, profesional y social, enriqueciendo el proceso formativo. La universidad de Córdoba define cinco (**comunicativa, investigativa, emprendimiento e innovación y ciudadana**) competencias generales comunes a todas las disciplinas, las cuales fundamentan y potencian las competencias específicas de cada profesión y en especial otorgan un sello a los graduados de la universidad.

- Expresa correctamente, oralmente y por escrito, en cualquiera de los idiomas oficiales de la Comunidad hispana.
- Posee habilidades informáticas relevantes para el campo de estudio.
- Desarrolla la capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.
- Muestra capacidad de gestión / dirección efectiva y eficiente: espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, control, toma de decisiones y negociación.
- Resuelve problemas de manera efectiva.
- Muestra capacidad para el trabajo en equipo.
- Compromiso con la ética, los valores de igualdad y responsabilidad social como ciudadano y profesional.
- Autoaprendizaje.
- Muestra la capacidad de adaptarse a nuevas situaciones.
- Adquiere una preocupación permanente por la calidad y el medio ambiente y la prevención de riesgos en el lugar de trabajo.
- Muestra la capacidad de transmitir información, ideas, problemas y soluciones a audiencias especializadas y no especializadas

5. CONTENIDOS

UNIDAD No.1 : DESARROLLO DE LA TEORÍA CUÁNTICA

Docencia Directa: 12 Horas y Trabajo Independiente: 15 Horas

- Introducción histórica
- Espacio vectorial de funciones
- La química cuántica y su relación con la Mecánica Cuántica.
- Descubrimiento del electrón.
- Determinación de la carga del electrón.
- Investigaciones entre la interacción de la radiación con la materia.



PLAN DE CURSO

- Radiación del cuerpo negro.
- Efecto fotoeléctrico.
- Espectros atómicos.
- Modelo atómico de Bohr.
- Dualidad onda partícula.
- Representaciones matriciales de kets, bras y operadores.
- Resolución de problemas en clase
- Taller N°1

UNIDAD No. 2: MODELO ACTUAL DEL ATOMO Y POSTULADOS DE LA MECANICA CUANTICA..

Docencia Directa: 16 Horas y Trabajo Independiente: 20 Horas

- La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.
- Primer postulado
- Segundo postulado.
- Tercer postulado.
- Cuarto postulado.
- Quinto postulado.
- Taller N°2.

UNIDAD No. 3: MECANICA CUANTICA DE ALGUNOS SISTEMAS ELEMENTALES.

Docencia Directa: 16 Horas y Trabajo Independiente: 20 Horas

- Partícula libre
- Partícula frente a un escalón de potencial.
- Transmisión de partículas a través de barreras de potencial y efecto túnel.
- Pozos de potencial.
- Partícula en una caja unidimensional!
- Partícula en un círculo de potencial.
- Partícula en una caja de potencial tridimensional.
- Taller N3.
- El oscilador armónico.
- Reducción del problema de dos partículas a una partícula.
- El rotor rígido.
- El átomo de hidrógeno.

Unidad No. 4: TRATAMIENTO SEMIEMPIRICO DE MOLÉCULAS POLIATOMICAS.

Docencia Directa: 20 Horas y Trabajo Independiente: 25Horas

- La aproximación de Born-Oppenheimer. El ión de la molécula de hidrógeno. Tratamientos aproximados del estado electrónico fundamental del H^{+2}



- El método del Orbital molecular de Huckel.
- Procedimiento de aplicación del método de Huckel.
- Energía de deslocalización.
- Orden de enlace.
- Densidad electrónica pi.
- Índice de valencia libre.
- Taller N°4.

6. ESTRATEGIAS METODOLÓGICAS

Las estrategias metodológicas de enseñanza que se están implementando para el logro de los propósitos de formación en el **curso de fisicoquímica**, son las clases magistrales, las prácticas de laboratorio, búsqueda bibliográfica, exposiciones, desarrollo de proyectos dirigidos, talleres, seminarios, entre otros.

Clase magistral: Consiste en la presentación oral de un tema por parte del docente de la asignatura, en forma resumida, permitiendo la participación activa y motivada de los estudiantes, mediante preguntas, análisis de casos, ejercicios, entre otros.

Prácticas de laboratorio: Desarrolla en el estudiante la habilidad de manipular montajes químicos, permite al estudiante comprobar experimentalmente los conceptos estudiados en la parte teórica de la asignatura, esta estrategia de aprendizaje desarrolla el espíritu crítico del estudiante y su creatividad, iniciativa, organización y disciplina de trabajo.

Exposiciones y Seminarios: Requiere que el estudiante desarrolle habilidades en la búsqueda bibliográfica de los temas, de igual forma lo profundice y lo presente en forma oral, esta estrategia de aprendizaje desarrolla el espíritu crítico y habilidad argumentativa que relaciona la practica con la teoría.

La investigación dirigida: Esta estrategia del aprendizaje logra que el estudiante relacione en forma directa los conceptos teóricos recibidos en las clases magistrales con los procesos químicos experimentales, los induce a buscar respuesta a problemas experimentales despertando en ellos el pensamiento científico, la creatividad y la iniciativa.

El taller: Esta estrategia pedagógica busca estimular la autoformación del estudiante, permite la participación abierta, el análisis y la comprensión de problemas reales del entorno, incentiva en el estudiante la interdisciplinariedad, el trabajo en equipo, mejorando sus competencias comunicativas, argumentativas y cooperativas entre ellos.

7. ACTIVIDADES Y PRÁCTICAS



UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA

CÓDIGO:
FDOC-088
VERSIÓN: 01
EMISIÓN:
22/02/2019
PÁGINA
7 DE 8

PLAN DE CURSO

7.1. Investigación Formativa

7.2. Extensión Formativa

7.3. Prácticas Académicas

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN PARA EL DESARROLLO DE COMPETENCIAS

Para evaluar el nivel de aprendizaje del estudiante, el profesor utilizará los siguientes medios o criterios:

- Evaluaciones cortas (Quices), orales o escritas
- Trabajos individuales o en grupos
- Ensayos
- Seminarios, ejercicios o informes
- Exposiciones
- Trabajos de práctica, clínica, taller, laboratorio o campo
- Evaluación acumulativa
- Otros, a consideración del profesor

9. BIBLIOGRAFÍA

9.1 Bibliografía en Castellano

Cuántica (átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas). Ed. Limusa. 2ª. Ed. 1968. N. H. Hanna.
Mecánica Cuántica para Químicos. Ed. Fondo Educativo Interamericano. 1969.
Cruz/Chamizo/Garriz. Estructura Atómica. Un Enfoque Químico. Ed. Adisson Wesley Iberoamericana. 1991.

Bertran Rusca, Joan [et al.]. Química cuántica: fundamentos y aplicaciones computacionales. Madrid : Síntesis, 2000. ISBN: 978-84-7738-742-8

Pérez Martínez, Juan Manuel; Esteban Elum, Ángel; GALACHE PAYÁ, María Paz. Problemas resueltos de química cuántica y espectroscopía molecular. San Vicente del Raspeig (Alicante) : Universidad de Alicante, 2001. ISBN: 978-84-7908-622-0



Requena Rodríguez, Alberto ; Zúñiga Román, José. Química física : problemas de espectroscopia : fundamentos, átomos y moléculas diatómicas. Madrid : Pearson Prentice Hall, 2007. ISBN: 978-84-8322-367-3

Levine, Ira N. Química cuántica. Madrid : Prentice Hall, 2001. ISBN: 84-205-3096-4

Atkins, Peter W.; De Paula, Julio. Atkins, Química física. Buenos Aires : Editorial Médica Panamericana, 2008. ISBN: 978-950-06-1248-7

Trapp, Charles A. ; Cady, Marshall P. ; Giunta, Carmen. Student solutions manual to accompany Atkins` Physical Chemistry. Oxford : Oxford University Press, 2014. ISBN: 978-0-19-870800-1 (rústica)

9.2 Bibliografía en inglés

Berry, R. Stephen. Physical chemistry. Oxford University Press. 2ª. Ed. New York. 2000.

P. A. Cox. Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure. Ed. Oxford University Press. 1996.

B. H. Bransden/C. J. Joachain. Physics of Atoms and Molecules. Ed. Longman Scientific & Technical. 1988.

Tarasov. Basic Concepts of Quantum Mechanics. Editorial Mir. (1980)

Galindo A., Pascual P. Mecánica Cuántica. Editorial Eudema (1989).

Wichman. Mecánica Cuántica. Berkeley Physics Course. Editorial Reverté (1977).

Kroeder H. Quantum Mechanics for engineering, materials science and applied physics. Editorial Prentice Hall (1994).

Haken-Wolf. The Physics of Atoms and Quanta. Introduction to experiments and theory. Editorial Springer-Verlag (1993).

9.3 Base de datos