



Tipo de actividad: Asignatura(QCA352)

Nombre: Química Cuántica.

Requisitos: QCA351, FIS212

Créditos: 4

Intensidad Horaria: 4 Horas semanales.

Correquisitos:

Introducción

Este curso busca que los estudiantes químicos comprendan los fenómenos moleculares desde el punto de vista microscópico con las herramientas teóricas que dan la mecánica estadística y la química física y mejoren su comprensión del mundo real en el cual viven y un mejor entendimiento de la ciencia química y su relación con otras ramas del conocimiento.

Objetivo General

- Comprender y manejar los conceptos de la química cuántica a través de la Ecuación de Schrodinger y su perfeccionamiento con las ecuaciones de Hartree Fock y los métodos de aproximación.

Contenido

1. UNIDAD I.

- Química Cuántica: Características del Comportamiento de las Micropartículas y Métodos Para las Descripción de sus Estados.
- Los orígenes de la teoría Cuántica.
- La radiación del cuerpo negro.
- El efecto fotoeléctrico.
- Las capacidades caloríficas de los sólidos.
- Espectros atómicos y moleculares.
- El modelo de Borh.
- La hipótesis de De Broglie.
- El principio de Incertidumbre de Heisenberg.
- La función de onda.
- La ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo e independiente del tiempo.
- La interpretación probabilística de la función de onda.

- Aplicación: partículas en un pozo cuadrado infinito unidimensional.
- Operadores. Valores promedio e incertidumbres de posición y momentum.

2. UNIDAD II.

- Principios De Mecánica Cuántica Formal.
- Los postulados de la mecánica cuántica.
- Operadores herméticos. Conjuntos ortonormales.
- Conmutación y el Principio de Incertidumbre.
- Sistemas simples unidimensionales. Partícula en un pozo cuadrado finito - tunelamiento.
- El oscilador armónico. Barrera de Potencial. Reflexión, transmisión y resonancias.
- Momentum angular.
- El rotor rígido.
- El átomo de hidrógeno. Orbitales atómicos.
- El efecto Stark y el efecto Zeeman.

3. UNIDAD III.

- Estructura y Espectros Atómicos.
- Unidades Atómicas. El Espín electrónico.
- El átomo de Helio.
- El Principio de Exclusión de Pauli.
- El método de Hartree-Fock. Átomos complejos.
- La tabla periódica. Acoplamiento de momento angulares.
- Términos atómicos y reglas de selección.
- Apantallamiento y Penetración.

4. UNIDAD IV.

- Métodos de Calculo de las Capas Electrónicas y Niveles de Energía de las Moléculas.

- Método de enlace de valencia.
- La aproximación de Born – Oppenheimer.
- La molécula de hidrógeno ionizada.
- Orbitales moleculares. Representación CLOA de orbitales moleculares.
- El método de Hartree-Fock para moléculas.
- Moléculas diatómicas.
- Moléculas poliatómicas.
- Sólidos.

5.UNIDAD V.

- La Química Cuántica y La Espectroscopia Molecular.
- Técnicas Experimentales.
- Intensidades espectrales.
- Perfiles.
- Espectroscopia Rotacional –Vibracional.
- El principio de Frank-Condon.
- Tipos de transiciones.
- Tipos de decaimiento.
- Láseres.
- Espectroscopia Foto electrónica.

Bibliografía

- ATKINS, P.W. Fisicoquímica. Tercera Edición. Addison-Weley. Washigton. 1991.
- LEVINE, I.N. Fisicoquímica. Tercera edición. McGraw-Hill. Bogota 1996.
- CASTELLÁN G.W. Fisicoquímica. Fondo Educativo Interamericano S.A.. 1987.

- LAIDLER, K.J. Físicoquímica, Kith J. Laidler. México: CESA, 1997.
- CLYDE R.M., Teoría y problemas de Físicoquímica.. 1977

