

UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO									
Nombre de la Unidad Académica:		División de Ciencias e Ingenierías							
Nombre del Programa Educativo:		Maestría en Ciencias Aplicadas							
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:		Química Cuántica y Computacional				Clave:		QCC	
Fecha de Elaboración:		9-Febrero-2012				Horas/Semana/Semestre			
Prerrequisitos					Teoría		4		
Cursada y Aprobada:					Práctica:		7		
Cursada:					Créditos:		8		
Caracterización de la Unidad de Aprendizaje									
Por el tipo de conocimiento:		Disciplinaria	X	Formativa	Metodológica				
Por la dimensión del Conocimiento:		Básica		General	Profesional	X			
Por la Modalidad de Abordar el Conocimiento:		Curso	X	Taller	Laboratorio	Seminario			
Por el Carácter de la Unidad de Aprendizaje:		Obligatoria		Recursable	Optativa	X	Selectiva	Acreditable	
Es Parte de un Tronco Común?		Sí		No	X				
Objetivos de la Unidad de Aprendizaje									
Que el estudiante aprenda los conceptos, teorías, leyes que rigen la mecánica cuántica y sus aplicaciones a sistemas químicos. Lograr conectar los casos de estudio de sistemas físicos simples como el oscilador armónico y el rotor rígido con su aplicación en sistemas moleculares más complejos. Comprender la resolución mecánico-cuántica del átomo de hidrógeno, y luego el uso de métodos aproximados para la resolución de átomos poli-electrónicos y moléculas.									
Contribución de la Unidad de Aprendizaje al Logro del Perfil de Egreso									
La correcta concepción del modelo atómico moderno en base a la resolución de la ecuación de onda de Schrodinger es fundamental para lograr una mejor comprensión de las propiedades fisicoquímicas de algunos sistemas atómicos y moleculares. En este curso se proveen las herramientas para lograr este objetivo con un énfasis en fundamentar las bases para la mejor comprensión de espectros atómicos y moleculares.									
Nombre del Programa		Maestría en Ciencias Aplicadas		Nombre de la Unidad de Aprendizaje		Química Cuántica y Computacional		Clave:	QCC
Tiempo Estimado Para el Logro de los Objetivos: 96 horas de clase					Criterios de Evaluación para Acreditar el Curso: Tomar en cuenta participación en clase, tareas, reportes y exámenes.				
Unidades y Objetos de Estudio	Objetivos Terminales	Productos de Aprendizaje	Actividades de Aprendizaje	Insumos Informativos	Actividad Evaluativa				
DESARROLLO HISTORICO DE LA MECANICA CUANTICA - Experimento de Thompson - Teoría del cuerpo negro - Cuantización de la energía - Efecto fotoeléctrico de Einstein - Cuantización del momento angular - Átomo de Bohr - Teoría de la dualidad de la materia de De Broglie	Que el estudiante conozca el desarrollo histórico de la cuantización de la materia y el surgimiento de la ecuación de onda (8 horas-clase).	Conocimientos sobre el desarrollo histórico del modelo atómico moderno	Asistencia a clase y entrega de tareas y exámenes.	Bibliografía	Tareas y exámenes Exposiciones en clase Desarrollo de proyectos Participación en clase Participación en discusiones grupales Autoevaluación y coevaluación Portafolio de evidencias En caso de laboratorio: reportes				

- Principio de incertidumbre de Heisenberg					de prácticas y bitácora
<p>LA ECUACION DE ONDA Y POSTULADOS DE LA MECANICA CUANTICA</p> <ul style="list-style-type: none"> - La ecuación de onda y sus soluciones - La ecuación de onda como un problema de eigenvalores - Operadores en mecánica cuántica - Operadores Hermitianos - Conmutabilidad de operadores 	Que el estudiante sea capaz de comprender los postulados de la mecánica cuántica y habilidad en el manejo del álgebra de operadores(8 horas-clase)	Conocimientos y entrenamiento en el manejo de la ecuación de Schrodinger y operadores.	Asistencia a clase, realización de tareas y exámenes	Bibliografía	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>LA PARTICULA EN UNA CAJA DE POTENCIAL</p> <ul style="list-style-type: none"> - La ecuación de Schrodinger del problema unidimensional - Solución al problema - La energía de la partícula está cuantizada - Extensión del problema al sistema tridimensional. 	Que el estudiante sea capaz de resolver la ecuación de Schrodinger de un sistema simple usando los postulados de la mecánica cuántica (6 horas-clase)	La resolución de la ecuación de onda para un sistema sencillo.	Asistencia a clase, estudio, realización de tareas y exámenes	Bibliografía	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>EL OSCILADOR ARMÓNICO</p> <ul style="list-style-type: none"> - La ley de Hooke - Resolución de la ecuación de onda para el problema - Los polinomios de Hermite - La cuantización de la energía y los niveles energéticos - Aplicación a vibraciones moleculares - Aplicación de conceptos a espectroscopía infrarroja 	Que el estudiante conozca e interprete la solución del problema del oscilador armónico y su aplicación a vibraciones moleculares (12 horas-clase)	Mejor comprensión de la solución de la ecuación de onda e interpretación de espectros infrarrojo.	Asistencia a clase, estudio, realización de tareas y exámenes	Bibliografía	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>EL ROTOR RIGIDO</p> <ul style="list-style-type: none"> - La resolución de la ecuación de Schrodinger del problema. - Los polinomios de Legendre - Niveles de energía del rotor 	Que el estudiante conozca e interprete la solución del problema del rotor rígido y su aplicación a	Mejor comprensión de la solución de la ecuación de onda e interpretación de espectros microondas.	Asistencia a clase, estudio, realización de tareas y exámenes	Bibliografía	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p>

<p>rígido</p> <ul style="list-style-type: none"> - Los armónicos esféricos - No conmutabilidad de los tres componentes del vector de momento angular. 	<p>rotaciones moleculares (12 horas-clase)</p>				<p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>EL ATOMO DE HIDRÓGENO</p> <ul style="list-style-type: none"> - Experimentos espectroscópicos de Balmer. Constante de Rydberg - Solución clásica del problema (modelo de Bohr) - Planteamiento de la ecuación de onda y su solución exacta. - Tipos de orbitales: s, p, d, f. - Rompimiento de la degeneración de niveles energéticos por presencia de un campo magnético. 	<p>Que el estudiante conozca y contraste la solución del problema átomo de hidrógeno desde el punto de vista de Bohr y de Schrodinger. (10 horas-clase)</p>	<p>Mejor comprensión del modelo atómico moderno.</p>	<p>Asistencia a clase, estudio, realización de tareas y exámenes</p>	<p>Bibliografía</p>	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>MÉTODOS APROXIMADOS</p> <ul style="list-style-type: none"> - La ecuación de onda del átomo de Helio no tiene solución exacta - Teoría de Perturbaciones - Método Variacional - El determinante Secular - Funciones de prueba y combinaciones lineales de las mismas. 	<p>Que el estudiante reconozca la necesidad de uso de los métodos aproximados ante la restricción matemática para la solución de la ecuación de onda. (12 horas-clase)</p>	<p>Obtención de soluciones muy cercanas a los datos experimentales para sistemas polielectrónicos y polinucleares.</p>	<p>Asistencia a clase, estudio, realización de tareas y exámenes</p>	<p>Bibliografía</p>	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplicación del método variacional y de perturbaciones al caso del Helio - El método de campo autoconsistente (Teoría Hartree-Fock). - Los electrones poseen funciones de onda antisimétricas (fermiones) 	<p>Que el estudiante aprenda el método de Hartree-Fock y contraste sus resultados con valores experimentales y métodos semiempíricos. (14 horas-clase)</p>	<p>Manejo de programas de métodos ab initio en computadora para cálculo de sistemas polielectrónicos.</p>	<p>Asistencia a clase, estudio, realización de tareas (en software computacional) y exámenes</p>	<p>Bibliografía</p>	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p>

<ul style="list-style-type: none"> - Determinante de Slater - Los símbolos de término son una descripción detallada de la configuración electrónica del átomo - Uso de los símbolos de término en espectroscopía atómica - Métodos semiempíricos 					En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora
MOLÉCULAS <ul style="list-style-type: none"> - Aproximación de Born-Oppenheimer - Descripción del enlace químico - Teoría de enlace-valencia - Teoría de orbitales moleculares - Orbitales de enlace y antienlace - Configuraciones electrónicas moleculares - Orbitales moleculares como combinaciones lineales de orbitales atómicos - Teoría de enlace de valencia y estructuras de Lewis. - Método de Huckel para sistemas π 	Que el estudiante extienda el uso del método de Hartree-Fock y contraste sus resultados con valores experimentales y métodos semiempíricos (14 horas-clase)	Manejo de programas de métodos ab initio en computadora para cálculo de sistemas moleculares.	Asistencia a clase, estudio, realización de tareas (en software computacional) y exámenes	Bibliografía	Tareas y exámenes Exposiciones en clase Desarrollo de proyectos Participación en clase Participación en discusiones grupales Autoevaluación y coevaluación Portafolio de evidencias En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora

Fuentes de Información

Bibliografía Básica:	Bibliografía Complementaria:
<ol style="list-style-type: none"> 1. Donald A. McQuarrie. Quantum Chemistry. University Science Books 1983. 2. John P. Lowe. Quantum Chemistry. Academic Press Inc. 1978. 3. Frank L. Pilar. Elementary Quantum Chemistry. Dover 1990. 	<ol style="list-style-type: none"> 4. Donald D. Fitts. Principles of Quantum Mechanics as applied to chemistry and chemical physics. Cambridge University Press 1999. 5. Peter Atkins and Ronald Friedman. Molecular Quantum Mechanics. Oxford University Press 2005. 6. Linus Pauling and E. Bright Wilson, Jr. Introduction to Quantum Mechanics with applications to Chemistry. Dover 1963.
	Otras Fuentes de Información: Artículos de investigación seleccionados por el profesor.
	Artículos de investigación