

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"> <li>- La ecuación de onda y sus soluciones</li> <li>- La ecuación de onda como un problema de eigenvalores</li> <li>- Operadores en mecánica cuántica</li> <li>- Operadores Hermitianos</li> <li>- Conmutabilidad de operadores</li> </ul>	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"> <li>- La ecuación de Schrodinger del problema unidimensional</li> <li>- Solución al problema</li> <li>- La energía de la partícula está cuantizada</li> <li>- Extensión del problema al sistema tridimensional.</li> </ul>	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"> <li>- La ley de Hooke</li> <li>- Resolución de la ecuación de onda para el problema</li> <li>- Los polinomios de Hermite</li> <li>- La cuantización de la energía y los niveles energéticos</li> <li>- Aplicación a vibraciones moleculares</li> <li>- Aplicación de conceptos a espectroscopía infrarroja</li> </ul>	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"> <li>- La resolución de la ecuación de Schrodinger del problema.</li> <li>- Los polinomios de Legendre</li> <li>- Niveles de energía del rotor</li> </ul>	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"> <li>- Los armónicos esféricos</li> <li>- No conmutabilidad de los tres componentes del vector de momento angular.</li> </ul>	<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"> <li>- Experimentos espectroscópicos de Balmer. Constante de Rydberg</li> <li>- Solución clásica del problema (modelo de Bohr)</li> <li>- Planteamiento de la ecuación de onda y su solución exacta.</li> <li>- Tipos de orbitales: s, p, d, f.</li> <li>- Rompimiento de la degeneración de niveles energéticos por presencia de un campo magnético.</li> </ul>	<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"> <li>- La ecuación de onda del átomo de Helio no tiene solución exacta</li> <li>- Teoría de Perturbaciones</li> <li>- Método Variacional</li> <li>- El determinante Secular</li> <li>- Funciones de prueba y combinaciones lineales de las mismas.</li> </ul>	<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"> <li>- Aplicación del método variacional y de perturbaciones al caso del Helio</li> <li>- El método de campo autoconsistente (Teoría Hartree-Fock).</li> <li>- Los electrones poseen funciones de onda antisimétricas (fermiones)</li> </ul>	<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"> <li>- Determinante de Slater</li> <li>- Los símbolos de término son una descripción detallada de la configuración electrónica del átomo</li> <li>- Uso de los símbolos de término en espectroscopía atómica</li> <li>- Métodos semiempíricos</li> </ul>					<p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p><b>MOLÉCULAS</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Aproximación de Born-Oppenheimer</li> <li>- Descripción del enlace químico</li> <li>- Teoría de enlace-valencia</li> <li>- Teoría de orbitales moleculares</li> <li>- Orbitales de enlace y antienlace</li> <li>- Configuraciones electrónicas moleculares</li> <li>- Orbitales moleculares como combinaciones lineales de orbitales atómicos</li> <li>- Teoría de enlace de valencia y estructuras de Lewis.</li> <li>- Método de Huckel para sistemas <math>\pi</math></li> </ul>	<p>Que el estudiante extienda el uso del 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 moleculares.</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> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>

**Fuentes de Información**

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