

Centro Universitario de los Lagos

División de Estudios de la Biodiversidad e Innovación Tecnológica Departamento de Ciencias de la Tierra y de la Vida

1. IDENTIFICACIÓN DEL CURSO

Química C	uántic	a Hegg 1 970 6 00	SERVICES.		22/08/2009		Ciaboracian
Clave de materia		Horas de teoría:	the participant	as de ctica:	Total de Hora	s: V	alor en créditos:
CB272 60 20		20	80	80 9			
Tipo de cur	so: (M	arque con una X	adinez C	il A			
C= XT	= aller	CT = curso-taller	S= semir	nario	L=) Laboratorio	C= clínic	a M= módulo
Nivel en qu	e ubic	a: (Marque con u	ına X)				seriana A
		L=Licenciatı	ura 🕽	(P=Pc	sgrado
		males (Materias Plan de Estudio		Sug CB189 Quími	errequisitos recor eridas en la ruta a Ecuaciones difer ca Inorgánica, CB Fisicoquímica	acadén enciale	nica aprobada) s, CB273
Departame	nto:						
Ciencias d	e la Ti	erra y de la Vida	a	ciario	range i unit da	<u> </u>	Teirina Lan
Carrera:							
Licenciatu	ra en l	ngeniería Bioqu	ıímica (II	3I)_ 		MUID.	Z. PMSSHVA Adualmenta i
Área de for	mación	n: (Marque con u	na X)			Tisa en- Tisan, al	e dat na et. - dam oblice
Básica	cipien	Básica particular	Básica		Especializan selectiva.	te X	Optativa abierta.



Centro Universitario de los Lagos

División de Estudios de la Biodiversidad e Innovación Tecnológica Departamento de Ciencias de la Tierra y de la Vida

Historial de revisiones:

		CALL SERVICE CONTRACTOR SECURIOR SECURE SECURIOR		
Acción:	Fecha:	Responsable		
Revisión,				
Elaboración		Hearline de la marreia		
Elaboración	22/08/2008	Dr. Francisco José Tenorio Rangel		
Revisión	08/01/2016	Dra. Virginia F. Marañón Ruiz, Dra. Egla Yareth Bivián Castro, Dra. Rita Judit Patakfalvi, Dr. Francisco José Tenorio Rangel, Dr. Luis Antonio Páez Riberos, Dra. Evelia Martínez Cano, M.C. Gerardo Alonso Torres		
olupón. a unaq	oncretoda :	Avalos, I.Q. Gabriel Piña Molina, Dra. Virginia Villa Cruz, Dra. María Guillermina Martínez Cisneros, Dra. Xóchitl Aparicio Fernández, M.C Jorge Alberto González Simental, M.C. María de los Ángeles Sotelo Olague		

A	Ca	N	P	m	12	١,

0:	A
Clencias	Químicas
Ololloloo	& MILLIONS

Aval de la Academia:

08/01/2016		
Nombre	Cargo	Firma
Dr. Luis Antonio Páez Riberos	Presidente	hing of Piac Rubor
Dra. Virginia F. Marañón Ruiz	Secretario	

2. PRESENTACIÓN

Actualmente, la Química Cuántica es uno de los campos más utilizados en el desarrollo de casi todas las ramas de la Química. En este curso se proporcionará un fundamento sólido mediante métodos de estudio de la estructura electrónica de los átomos y las moléculas, que sirven como base para el desarrollo de metodologías prácticas y computacionales.

Para que el alumno pueda elegir esta materia, se sugiere que haya cumplido los prerrequisitos recomendados.

En este curso se condensan y ponen a prueba los conocimientos que el alumno tiene sobre las asignaturas básicas de Química.

3. OBJETIVO GENERAL

El alumno deberá comprender los fundamentos de la mecánica cuántica, así como su



Centro Universitario de los Lagos

División de Estudios de la Biodiversidad e Innovación Tecnológica Departamento de Ciencias de la Tierra y de la Vida

aplicación a problemas de Química.

4. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

El alumno deberá:

Comprender y aplicar algunas técnicas para resolver de forma aproximada la ecuación de Schrödinger.

Comprender las propiedades fisicoquímicas en sistemas moleculares.

Conocer los alcances y limitaciones de los métodos *ab inítio* y semiempíricos en átomos y moléculas.

Aplicar los métodos *ab initio* y semiempíricos en el estudio de la estructura electrónica de sistemas pequeños.

5. CONTENIDO

Temas y Subtemas

TEMA 1: Motivación de la Mecánica Cuántica.

La radiación del cuerpo negro.

El efecto fotoeléctrico.

Dualidad onda-materia, difracción de electrones.

Espectros atómicos.

TEMA 2. La ecuación de Schrödinger.

La ecuación de Schrödinger dependiente e independiente del tiempo.

Principio de incertidumbre.

La función de onda y su interpretación.

Partícula en una caja en 1-D y 3-D.

Oscilador armónico.

Rotor rígido.

TEMA 3: Operadores y mecánica cuántica.

Probabilidad y valores medios.

Operadores y propiedades de los operadores.

Conmutadores

Ecuaciones en valores propios.

Notación de Dirac.

TEMA 4. Átomos.

El átomo de Hidrogeno.

Orbitales, densidad electrónica y espin electrónico.

Transiciones entre niveles de energía electrónica.

Átomos polielectrónicos, aproximación orbital.

TEMA 5: Método variacional.

Variaciones lineales: la ecuación secular.

El método Hückel simple.

TEMA 6. Moléculas y enlace químico.

La ecuación de Schrödinger molecular.



Centro Universitario de los Lagos

División de Estudios de la Biodiversidad e Innovación Tecnológica Departamento de Ciencias de la Tierra y de la Vida

La aproximación de Born-Oppenheimer.

La ecuación de Schrödinger electrónica, orbitales moleculares. Mapas de densidad electrónica.

TEMA 7. Aplicaciones.

Moléculas poliatómicas, geometrías moleculares. Superficies de energía potencial. Estructura electrónica de moléculas.

Diseño molecular asistido por computadora -practicas computacionales.

6. TAREAS, ACCIONES Y/O PRÁCTICAS DE LABORATORIO

Introducción a los métodos computacionales de estructura electrónica

Enlace químico

Análisis conformacional

Estados de transición

Energía de solvatación

7. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

// 1	DIDLIOGRAFIA DASICA
1	Ira N. Levine, Quimica Cuantica, Prentice Hall, 5a. Edición. España, 2001.
2	Peter Atkins, Julio de Paula; Quimica Fisica, Medica Panamericana; 8a. Ed. Argentina, 2008
3	David B. Cook, Handbook of Computational Quantum Chemistry, Dover, USA, 2005.
4	Ira N. Levine, Quantum Chemistry, Pearson Prentice Hall, 6a. Ed. USA, 2009.
5	American Chemical Society, Química - un proyecto de la ACS -, Reverte, España, 2005

8. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1	Thomas Engel, Warren Hehre; Quantum chemistry and spectroscopy. Pearson, 3rd ed.USA, 2013
2	George C. Schatz, Mark A. Ratner. Quantum Mechanics in Chemistry. Dover. USA. 2002.
3	Frank L. Pilar. Elementary Quantum Chemistry. Dover, USA. 2001.
4	Donald A. Mc Quarrie, Quantum Chemistry, University Science Books, USA, 1983.
5	Juan M. Pérez Martínez, Ángel L. Esteban Elum, María Paz Galache Payá. Problemas resueltos de química cuántica y espectroscopia molecular, Universidad de Alicante, España, 2001.

9. CRITERIOS Y MECANISMOS PARA LA ACREDITACION

Acreditación: Para tener derecho a examen ordinario el alumno deberá cumplir con un



Centro Universitario de los Lagos

División de Estudios de la Biodiversidad e Innovación Tecnológica Departamento de Ciencias de la Tierra y de la Vida

80% de las asistencias y para tener derecho a examen extraordinario el alumno deberá cumplir con el 60% de las asistencias. Asimismo, esta materia puede ser acreditada por competencias para lo cual el alumno habrá de registrar su solicitud en el departamento al cual pertenece la materia, de acuerdo con el calendario escolar vigente.

10. EVALUACIÓN Y CALIFICACIÓN

Unidad de Competencia:	Porcentaje:
Examen Departamental	30
Exámenes Parciales	40
Productos de Práctica	20
Participación	10