



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de los Lagos

División de Estudios de la Biodiversidad e Innovación Tecnológica

Departamento de Ciencias Exactas y Tecnología

1. IDENTIFICACIÓN DEL CURSO

Nombre de la materia

Química Cuántica

Clave de la materia:	Horas de teoría:	Horas de práctica:	Total de Horas:	Valor en créditos:
IE085	20	60	80	7

Tipo de curso: (Marque con una X)

C= Curso	<input type="checkbox"/>	P= Práctica	<input type="checkbox"/>	CT = Curso-Taller	<input checked="" type="checkbox"/>	M=Módulo	<input type="checkbox"/>	C= Clínica	<input type="checkbox"/>	S= Seminario	<input type="checkbox"/>
----------	--------------------------	-------------	--------------------------	-------------------	-------------------------------------	----------	--------------------------	------------	--------------------------	--------------	--------------------------

Nivel en que ubica: (Marque con una X)

L=Licenciatura	<input checked="" type="checkbox"/>	P=Posgrado	<input type="checkbox"/>
----------------	-------------------------------------	------------	--------------------------

Prerrequisitos formales (Materias previas establecidas en el Plan de Estudios)	Prerrequisitos recomendados (Materias sugeridas en la ruta académica aprobada)
Química, Química Inorgánica, Ecuaciones diferenciales	

Departamento: DCTV		
Carrera: IMEC		
Área de formación:		
Historial de revisiones:	Fecha:	Responsable:
Elaboración Dr. Francisco José Tenorio Rangel		

Academia: Ciencias Químicas	
Aval de la Academia:	

2. OBJETIVO GENERAL

El alumno deberá comprender los fundamentos de la mecánica cuántica, así como su aplicación a problemas de Química y Ciencia de Materiales

3. 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 Hidrógeno. Orbitales, densidad electrónica y espín electrónico. Transiciones entre niveles de energía electrónica. Átomos polieletrónicos, 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.



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de los Lagos

División de Estudios de la Biodiversidad e Innovación Tecnológica

Departamento de Ciencias Exactas y Tecnología

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 -prácticas computacionales

4. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA (Preferentemente ediciones recientes, 5 años)

- Ira N. Levine, Química Cuántica, Prentice Hall, 5ª. Edición. España, 2001
- Peter Atkins, Julio de Paula; Química Física, Médica Panamericana; 8a. Ed. Argentina, 2008
- Ira N. Levine, Quantum Chemistry, Pearson Prentice Hall, 6ª. Ed. USA, 2009