



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

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

Nombre de la materia

Química Cuántica

Clave de la materia:	Horas de teoría:	Horas de práctica:	Total de Horas:	Valor en créditos:
H0675	48	16	64	7

Tipo de curso: (Marque con una X)

C= curso	T= Taller	CT = curso-taller	X	S= seminario	L= Laboratorio	C= clínica	M= módulo
----------	-----------	-------------------	---	--------------	----------------	------------	-----------

Nivel en que ubica: (Marque con una X)

L=Licenciatura	X	P=Posgrado
----------------	---	------------

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:

Ciencias Exactas y Tecnología

Carrera:

Licenciatura en Ingeniería Mecatrónica (MEC)

Área de formación: (Marque con una X)

Básica común obligatoria.	Básica particular obligatoria.	Básica particular selectiva.	Especializante selectiva.	Optativa abierta.	X
---------------------------	--------------------------------	------------------------------	---------------------------	-------------------	---

Historial de revisiones:

Acción: Revisión, Elaboración	Fecha:	Responsable
Elaboración	22 de enero de 2008	Dr. Francisco José Tenorio Rangel



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de los Lagos

División de Estudios de la Biodiversidad e Innovación Tecnológica

Departamento de Ciencias de la Tierra y de la Vida

Revisión	Julio 2015	Dr. Francisco José Tenorio Rangel Dra. Virginia F. Marañón Ruiz Dra. Rita Judit Patakfalvi Dra. Eglá Yareth Bivián Castro M.C. Angeles Sotelo Olague Dra. Virginia Villa Cruz Dra. Evelia Martínez Cano Dr. Luis Antonio Páez Riberos
-----------------	-------------------	--

Academia:

Ciencias Químicas

Aval de la Academia:

Nombre	Cargo	Firma
Dr. Francisco José Tenorio Rangel	Presidente	
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 y Ciencias de Materiales. 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.

En este curso se condensan los conocimientos que el alumno tiene sobre las asignaturas básicas de Química, así como de Ecuaciones Diferenciales.

3. OBJETIVO GENERAL

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

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 initio* y semiempíricos en átomos y



moléculas.

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

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 Hidrógeno.

Orbitales, densidad electrónica y espín 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.



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.

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	Ira N. Levine, Química Cuántica, Prentice Hall, 5ª. Edición. España, 2001.
2	Peter Atkins, Julio de Paula; Química Física, Médica 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 (Preferentemente ediciones recientes, 5 años)

1	Attila Szabo, Neil S. Ostlund. Modern Quantum Chemistry. Introduction to advanced electronic structure theory. Dover. USA. 1996.
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	Warren J. Hehre. A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations. Wavefunction, Inc. USA. 2003

9. CRITERIOS Y MECANISMOS PARA LA ACREDITACION

Acreditación: Para tener derecho a calificación en periodo ordinario el alumno deberá cumplir con un 80% de las asistencias y para tener derecho a extraordinario con el 65%.

Se realizará un examen Departamental.

Las cantidades de exámenes parciales y la(s) Investigación/ exposiciones/ tareas estará sujeto al acuerdo entre el profesor de la asignatura y los estudiantes correspondientes.

Las prácticas serán evaluadas siempre y cuando el alumno haya asistido a la sesión de laboratorio correspondiente y entregue su reporte en tiempo y forma.

A los estudiantes que participen en la Feria de la Ciencia se les podrá otorgar de 1 a 10 puntos extras de acuerdo al criterio del profesor con base a la calidad del trabajo presentado en el evento y siempre y cuando hayan aprobado el examen departamental.

Asimismo, esta materia puede ser acreditada por competencias para lo cual el alumno deberá registrar su solicitud en el departamento al cual pertenece la materia, de acuerdo con el calendario escolar vigente. Esta materia también puede ser sujeta a revalidación, acreditación o convalidación de acuerdo con la normatividad vigente.

10. EVALUACIÓN Y CALIFICACIÓN

Unidad de Competencia:	Porcentaje:
Examen Departamental	35%
Exámenes Parciales	30%
Laboratorio	20%
Investigación, exposiciones y tareas	15%
Total	100%