

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA**

**PROGRAMAS DE ESTUDIO
CUARTO SEMESTRE**

Asignatura QUÍMICA CUÁNTICA I	Ciclo FUNDAMENTALES DE LA PROFESIÓN	Área FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICA	Departamento FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICA
---	--	--	--

HORAS/SEMANA/SEMESTRE

OBLIGATORIO	Clave 1404	TEORÍA 3 h/48h	PRÁCTICA 2 h/32h	CRÉDITOS 8
--------------------	-------------------	-----------------------	-------------------------	-------------------

Tipo de asignatura:	TEÓRICA
Modalidad de la asignatura:	CURSO

ASIGNATURA PRECEDENTE: Seriación obligatoria con Fundamentos de Espectroscopia

ASIGNATURA SUBSECUENTE: Seriación sugerida con Química Cuántica II

OBJETIVO(S):

En este curso se presentarán los conceptos y técnicas básicas que el químico emplea en la actualidad para comprender y predecir las propiedades de las moléculas o, dicho de otra manera, se analizan en detalle los conceptos modernos de enlace químico. Este curso complementa al de Estructura de la Materia en dos sentidos: es más formal y más amplio. Ello es posible gracias a varios factores que se habrán acumulado entre ambos cursos: un dominio de ciertas técnicas matemáticas, un conocimiento ampliado de la química de sistemas específicos, un uso de la espectroscopia y los conceptos elementales de Estructura de la Materia y, en el aspecto que llamaríamos efectivo, una maduración profesional. Los alumnos conocerán la teoría cuántica en tal forma que puedan aplicarla a problemas químicos evaluando la calidad de sus aproximaciones y por tanto la validez, general o restringida, de sus conclusiones. Tendrán una perspectiva de las similitudes y diferencias de los tipos de enlace químico y de los métodos y conceptos con que se les suele describir, sus alcances y sus limitaciones. Aprenderán el valor de los conceptos fundamentales en la solución de problemas químicos.

UNIDADES TEMÁTICAS

NÚMERO DE HORAS POR UNIDAD	UNIDAD
10T 10h	1. Fundamentos de la mecánica cuántica. Presentación axiomática. Teoremas fundamentales
10T 10h	2. Aplicaciones de la mecánica cuántica a sistemas sencillos (Problemas sencillos) 2.1. Partícula libre 2.2. Partícula en una caja de potencial (1D, 2D y 3D) 2.3. Partícula en un pozo de potencial (barreras finitas, opcional) 2.4. Efecto túnel 2.5. Potencial periódico (mencionado no trabajado, opcional) 2.6. Oscilador armónico 2.7. Rotor rígido
10T 10h	3. Átomo de Hidrógeno, Solución de la ecuación de Schrödinger, Orbitales Momento Angular y Espín Momento angular en mecánica cuántica Experimento Stern-Gerlach y momento magnético Momento angular de espín Sistemas de N partículas indistinguibles Estadística de fermiones y Postulado de Pauli Funciones de onda simétricas y anti-simétricas

5T 5h	4. Métodos Aproximados Método variacional: teorema variacional Teoría de Perturbaciones
5T 5h	5. Dos electrones: Helio Teoría de perturbaciones a primer orden Método variacional
5T 5h	6. Sistema de muchos electrones Moléculas: Aproximación Born-Oppenheimer Método de Hartree: SCF
10T 10h	7. Hartree-Fock Función de onda polielectrónica: determinantes de Slater Presentación del método Aplicaciones computacionales (salón de cómputo)
10T 10h	8. Más allá de HF: la correlación electrónica Energía de correlación Métodos aproximados para la función de onda a) métodos variacionales: CI y derivados, CC b) métodos perturbativos: MPn Aplicaciones computacionales (salón de cómputo)
10T 10h	9. Teoría de Funcionales de la densidad Principios básicos: Thomas Fermi-Dirac Teoremas de Hohenberg-Kohn Método de Kohn-Sham El problema del funcional de intercambio y correlación Aplicaciones computacionales (salón de cómputo)
5T 5h	10. Espectroscopia molecular Momento dipolar de transición y regla de selección Aplicaciones: la partícula en una caja, el oscilador armónico y el rotor rígido.

TOTAL 80T-80H

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

1. Levine, I. N., Quantum Chemistry, 7a Ed, New Jersey, Prentice Hall, 2013.
2. Atkins, P. W. y Friedman, R. S., Molecular Quantum Mechanics, 5a. Ed, Oxford University press, 2010
3. McQuarrie, D. A. y Simon, J. D., Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, 1997.
4. Lowe, J. P., Quantum Chemistry, 3ra. Ed, Elsevier, Academic Press, 2005.
5. Hanna M. W., Mecánica cuántica para químicos. Fondo Educativo Interamericano, 1985

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. Pilar F.L, Elementary Quantum Chemistry, Second Edition Dover Publications, 2011
2. McQuarrie D.A., Quantum Chemistry University Science Books; 2 Ed, 2007

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS

En todo el curso se usan ejercicios computacionales como una forma específica de práctica, y es posible graduar su complejidad a las capacidades y a los intereses específicos del alumno

FORMA DE EVALUAR

Exámenes parciales, departamental y finales, proyecto.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DE QUIENES PUEDEN IMPARTIR LA ASIGNATURA

Químicos con especialidad en química cuántica.