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:
CB272	**60**	**20**	**80**	**9**

Tipo de curso: (Marque con una X)																			
C= curso		P= practica		CT = curso–taller	X	M= módulo		C= clínica		S= seminario	

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)
	CB185, CB273, CB274, CB201

Departamento:

DCTV

Carrera:

Licenciatura en Ingeniería Bioquímica

Área de formación:

Área de formación básica común obligatoria.		Área de formación básica particular obligatoria.		Área de formación básica particular selectiva.		Área de formación especializante selectiva.	X	Área de formación optativa abierta.	

Historial de revisiones:

Acción:	Fecha:	Responsable
Elaboración	**22 de enero de 2008**	**Dr. Francisco José Tenorio Rangel**
Revisión	**Julio de 2013**	**Dra. Egla Yareth Bivián Castro** **Dra. Evelia Martínez Cano** **Dra. Virginia Francisca Marañón Ruíz** **Dr. Francisco José Tenorio Rangel** **Dr. Luis Antonio Páez Riberos** **Dra. Rita Judit Patakfalvi** **Ing. Gabriel Piña Molina** **M. en C. Gerardo Alonso Torres Avalos** **M. en C. Gabriela Camarillo Martínez** **Dra. Martínez Cisneros María Guillermina** **Ing. Eva Montantes**

Academia:

Ciencias Químicas

Aval de la Academia:

Julio de 2013		
Nombre	**Cargo**	**Firma**
Dra. Evelia Martínez Cano	**Presidente**	
Ing. Gabriel Piña Molina	**Secretario**	
Dra. Virginia F. Marañón Ruíz	**Vocal**	
Dr. Francisco José Tenorio Rangel	**Vocal**	
Dra. Egla Yareth Bivián Castro	**Vocal**	
Dra. Rita Judit Patakfalvi	**Vocal**	
M. en C. Gabriela Camarillo Martínez	**Vocal**	
Dr. Luis Antonio Páez Riberos	**Vocal**	
M. en C. Gerardo A. Torres Avalos	**Vocal**	
Dra. María Guillermina Martínez Cisneros	**Vocal**	
Ing. Eva Montantes	**Vocal**	

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 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 initio* 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 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

1	Attila Szabo, Neil S. Ostlund. Modern Quantum Chemistry. Introduction to advanced electronic structrure 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
5	

9. CRITERIOS Y MECANISMOS PARA LA ACREDITACION

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

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	30%
Exámenes Parciales	50%
Productos de Práctica y Participación	20%
Total	100