



UNIDAD: IZTAPALAPA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
NIVEL: LICENCIATURA		EN QUÍMICA	
CLAVE: 2141083	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: FISICOQUÍMICA IV		TRIM: V-VIII
HORAS TEORÍA: 3	SERIACIÓN 213191		CRÉDITOS: 7
HORAS PRÁCTICA: 1			OPT/OBL: OBL.

OBJETIVO(S):**GENERAL**

Que al final del curso el alumno sea capaz de comprender y aplicar los métodos de la mecánica cuántica en sistemas de interés químico.

ESPECÍFICOS

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Comprender el origen y los principios de la mecánica cuántica.
- Describir la ecuación de Schrödinger y los postulados de la mecánica cuántica.
- Comprender el origen de la cuantización.
- Explicar los movimientos translacional, vibracional y rotacional.
- Describir la estructura de átomos hidrogenoides.
- Definir el spin del electrón.
- Comprender el principio de exclusión de Pauli.
- Explicar los conceptos de orbital y de campo autoconsistente en átomos polieletrónicos.
- Describir la aproximación de Born-Oppenheimer.
- Comprender el principio variacional.
- Utilizar el método variacional en el caso de combinación lineal de funciones.
- Comprender el concepto de conjunto de funciones atómicas de base.
- Describir la teoría de orbitales moleculares utilizando la combinación lineal de funciones atómicas de base.
- Conocer las características básicas de los métodos más utilizados en cálculos de estructura electrónica.
- Comprender los aspectos básicos contenidos en un paquete computacional de cálculos de estructura electrónica.
- Proporcionar la información necesaria para ejecutar los programas y analizar los resultados.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		2/3
CLAVE 2141083	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE FISICOQUÍMICA IV	

CONTENIDO SINTÉTICO:

1. Teoría cuántica: Introducción y principios.
 - 1.1 Los orígenes de la mecánica cuántica.
 - 1.2 La dinámica de sistemas microscópicos.
 - 1.3 Los principios de la mecánica cuántica.
2. Teoría cuántica: Técnicas y aplicaciones.
 - 2.1 Movimiento translacional.
 - 2.2 Movimiento vibracional.
 - 2.3 Movimiento rotacional.
 - 2.4 Teoría de perturbaciones.
3. Estructura de átomos hidrogenoides.
4. Spin y principio de exclusión de Pauli.
5. Estructura de átomos polielectrónicos.
6. La aproximación de Born-Oppenheimer.
7. El método variacional.
 - 7.1 Principio variacional.
 - 7.2 Combinación lineal de funciones.
8. Teoría de orbitales moleculares.
 - 8.1 Funciones de base.
 - 8.2 Ecuaciones de Hartree-Fock-Roothaan.
9. Métodos para el cálculo de estructura electrónica.
 - 9.1 Métodos basados en la función de onda.
 - 9.2 Métodos semiempíricos.
 - 9.3 Métodos basados en la densidad electrónica.
10. Propiedades moleculares.

MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

- Clase de teoría en forma de conferencia magistral.
- Clase en forma de taller en salas de cómputo.
- Seminario impartido por alumnos (individual o por equipo) al final del trimestre.
Se entenderá por taller una sesión en la que los alumnos resuelven ejercicios dirigidos por el profesor, ésta se desarrollará en el laboratorio de cómputo.
Se recomienda que las sesiones de taller sean organizadas con base en la resolución de problemas que incluyan:
- Resolver problemas específicos de aplicación de los conceptos en diferentes disciplinas (actividad de integración) en el laboratorio de cómputo.
- Desarrollar prácticas de laboratorio de cómputo diseñadas por el profesor.
- A partir de la semana 8, adiestrar al alumno en el uso de un paquete computacional de cálculos de estructura electrónica.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		3/3
CLAVE 2141083	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE FISICOQUÍMICA IV	

MODALIDADES DE EVALUACIÓN:

Evaluación Global:

- Evaluaciones periodicas (al menos tres procurando que sean de carácter acumulativo o integrador).
 - Reporte escrito y presentación oral (al menos uno de cada uno).
 - Pruebas de ejecución (taller de cómputo).
 - Tareas periódicas (al menos tres).
- La ponderación de todas estas evaluaciones quedará a juicio del profesor.

Evaluación de Recuperación:

- El curso podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación.

BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE

Como libro de texto:

1. Atkins, P. W. y De Paula, J., *Atkins' Physical Chemistry*, 8ª Edición, W. H. Freeman, 2006.

Como libros de consulta:

1. Levine, I. N., *Physical Chemistry*, 6ª Edición, McGraw Hill, 2009.
2. Levine, I. N., *Quantum Chemistry*, 6ª Edición, Prentice Hall, 2008.
3. Cramer, C. J., *Essentials of Computational Chemistry*, 2ª Edición, Wiley, 2004.
4. Jensen, F., *Introduction to Computational Chemistry*, 2ª Edición, John Wiley & Sons, 2007.
5. Foresman, J. B. y Frisch, A., *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, 2ª Edición, Gaussian, 1996.