



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

Universidad Autónoma del Estado de México

Licenciatura en Física 2003

Programa de Estudios:

Química Cuántica



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

I. Datos de identificación

Licenciatura **Física 2003**

Unidad de aprendizaje **Química Cuántica** Clave

Carga académica **4** **2** **6** **10**

Horas teóricas

Horas prácticas

Total de horas

Créditos

Período escolar en que se ubica **1** **2** **3** **4** **5** **6** **7** **8** **9**

Seriación **Física Cuántica** **Ninguna**

UA Antecedente

UA Consecuente

Tipo de Unidad de Aprendizaje

Curso ☐ Curso taller ☒

Seminario ☐ Taller ☐

Laboratorio ☐ Práctica profesional ☐

Otro tipo (especificar)

Modalidad educativa

Escolarizada. Sistema rígido ☐ No escolarizada. Sistema virtual ☐

Escolarizada. Sistema flexible ☒ No escolarizada. Sistema a distancia ☐

No escolarizada. Sistema abierto ☐ Mixta (especificar)

Formación común

Biología 2003 ☐ Biotecnología 2010 ☐

Matemáticas 2003 ☐

Formación equivalente

Unidad de Aprendizaje

Biología 2003

Biotecnología 2010

Matemáticas 2003



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

II. Presentación

En esta asignatura se pretende proporcionar los fundamentos de la Mecánica Cuántica, utilizando el formalismo de la ecuación de onda de Schrödinger. Partiendo del conocimiento adquirido en cursos anteriores, se formula la ecuación de ondas y se estudian las aplicaciones sencillas mas relevantes para la química. Gran parte de la química cuántica está enfocada en el estudio del comportamiento de átomos y moléculas en cuanto a sus propiedades ópticas, eléctricas, magnéticas y mecánicas, también se encarga de estudiar su reactividad química y sus propiedades, de igual manera se estudian materiales, tanto sólidos extendidos como superficies. De manera frecuente y en la actualidad se considera como primer cálculo de química cuántica el llevado a cabo sobre la molécula de hidrógeno (H_2) en 1927 por los científicos Alemanes Walter Heiter y Fritz London. Posteriormente el método de Heitler y London fue perfeccionado por los químicos norteamericanos John C. Slater y Linus Pauling, para convertirse el método de enlace de valencia o Heitler-London-Slater-Pauling (HLSP). En este método, se presta atención particularmente a las interacciones entre pares de átomos, y por tanto se relaciona mucho con los esquemas clásicos de enlaces entre átomos. Friedrich Hund y Robert S. Mulliken desarrollaron un método alternativo, en que los electrones se describían por funciones matemáticas deslocalizadas por toda la molécula. El método de Hund-Mulliken o de orbitales moleculares es menos intuitivo para los químicos, pero, al haberse comprobado que es más potente a la hora de predecir propiedades que el método de enlace de valencia, es virtualmente el único usado en los últimos años

III. Ubicación de la unidad de aprendizaje en el mapa curricular

Núcleo de formación: Integral

Área Curricular: Física Teórica Cuántica

Carácter de la UA: Optativa

IV. Objetivos de la formación profesional.

Objetivos del programa educativo:

Formar especialistas con conocimientos de la Física teórica, experimental y computacional que les permitan participar en la generación, aplicación y difusión de los mismos, colaborando en la solución de problemas de índole social y natural que requieran del conocimiento científico.

**Objetivos del núcleo de formación:**

Proporcionar una visión integradora de carácter interdisciplinario, multidisciplinario y transdisciplinario para adquirir conocimientos específicos de su interés en los diversos escenarios donde tiene lugar la profesión del Físico.

Objetivos del área curricular o disciplinaria:

Proporcionar los conceptos básicos que permitan describir los fenómenos físicos a nivel atómico.

V. Objetivos de la unidad de aprendizaje.

Introducir al alumno en los conceptos básicos de la mecánica cuántica para que los pueda aplicar a la resolución analítica de sistemas simples con el fin de revisar los fundamentos y obtener conclusiones y aproximaciones necesarias para el tratamiento de sistemas más complejos de interés químico como son la estructura electrónica de átomos, moléculas y las reacciones químicas. De igual manera, se pretende que el alumno comprenda los estudios relacionados con los átomos y moléculas de la química a partir de las interacciones entre sus partículas desde un punto de vista mecánico y cuántico.

VI. Contenidos de la unidad de aprendizaje y su organización**Unidad 1.** Introducción A La Mecánica Cuántica.

Objetivo: Se discuten los conceptos básicos de la radiación del cuerpo negro, efecto fotoeléctrico, capacidad calorífica de los sólidos, dualidad onda-partícula, difracción de electrones y espectros atómicos.

Unidad 2. La ecuación de Schrôndinger.

Objetivo: Se analiza la teoría relacionada con la ecuación de Schrôndinger independiente y dependiente del tiempo, de igual manera se estudia el principio de incertidumbre, la función de onda y de manera particular se analizan el sistema de partículas dentro de una caja unidimensional, el oscilador armónico, el rotor rígido, la barrera de potencial y el efecto túnel.

Unidad 3. Átomos.

Objetivo: Se introduce al alumno un enfoque relacionado con el átomo de hidrógeno, se analiza el alcance de esta teoría sobre el estudio de orbitales,



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

densidad electrónica y el espín electrónico. Para complementar más esta unidad de aprendizaje se continuará con el estudio relacionado con las transiciones entre niveles de energía electrónica, de manera particular se analizan los átomos polielectrónicos y las configuraciones electrónicas de Pauli y Aufbau.

Unidad 4. Moléculas y enlaces químicos.

Objetivo: En esta parte de unidad de aprendizaje se estudia la ecuación de Schrödinger molecular, electrónica, la aproximación de Born-Oppenheimer. De manera particular se estudia la molécula de H_2^+ , moléculas diatómicas, poliatómicas, reacciones químicas y superficies de energía potencial.

VII. Sistema de Evaluación

Exámenes	70%
Tareas	20%
Participación en clase	10%

VIII. Acervo Bibliográfico

P.A. Cox, Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure, Oxford Chemistry Primers 37, Ed. Oxford University Press, 1996

D. A. McQuarrie, Quantum Chemistry, University Science Books, 1983

R.A. Alberty and R.J. Silbey, Physical Chemistry, Ed. Wiley and Sons, 2001.

I.N. Levine, Fisico-química, Ed. Mc. Graw-Hill, 1999 (4a edición).

G.M. Barrow, Química Física, Ed. Reverté, 1985.

W.J. Moore, Química Física, Ed. Urmo, 1978.

P.N. Atkins, Fisicoquímica. Addison-Wesley, 1991.