

UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO										
NOMBRE DE LA ENTIDAD:		CAMPUS LEÓN; DIVISIÓN DE CIENCIAS E INGENIERÍAS								
NOMBRE DEL PROGRAMA EDUCATIVO:		Licenciatura en Ingeniería Química								
NOMBRE DE LA MATERIA:		Química Cuántica					CLAVE:		POQC-08	
FECHA DE ELABORACIÓN:		13 de Junio de 2011					HORAS/SEMANA/SEMESTRE			
FECHA DE ACTUALIZACIÓN:										
ELABORÓ:		Leonardo Álvarez Valtierra								
PRERREQUISITOS:						TEORÍA:		3		
CURSADA Y APROBADA:		Ninguno				PRÁCTICA:		0		
CURSADA:		Ninguno				CRÉDITOS:		6		
CARACTERIZACIÓN DE LA MATERIA										
POR EL TIPO DE CONOCIMIENTO:		DISCIPLINARIA		FORMATIVA		METODOLÓGICA				
POR LA DIMENSIÓN DEL CONOCIMIENTO:		ÁREA BÁSICA		ÁREA GENERAL		ÁREA PROFESIONAL		X		
POR LA MODALIDAD DE ABORDAR EL CONOCIMIENTO:		CURSO		TALLER		LABORATORIO		SEMINARIO		
POR EL CARÁCTER DE LA MATERIA:		OBLIGATORIA		RECURSABLE		OPTATIVA		X		
ES PARTE DE UN TRONCO COMÚN O MATERIAS COMUNES:		SÍ		NO		X				
COMPETENCIA (S) GENERAL(ES) DE LA MATERIA:										
<ol style="list-style-type: none"> 1. Conocer e introducir las bases teóricas de la mecánica cuántica y su impacto en el desarrollo del modelo atómico moderno. 2. Comprender los experimentos de inicios del siglo XX, que dieron lugar a la física moderna. 3. Comprender los fundamentos de la mecánica cuántica aplicada a sistemas sencillos. 4. Conocer y comprender los conceptos de orbitales moleculares, funciones de onda, ecuación de onda, funciones base, etc. en base al estudio del modelo matemático del átomo y moléculas. 5. Conocer los diferentes modelos de enlace químico y la teoría de orbitales moleculares. 6. Introducir los diferentes tipos de espectroscopias moleculares en base a los grados de libertad moleculares y sus energías de absorción en el espectro electromagnético. 										
CONTRIBUCIÓN DE LA MATERIA AL LOGRO DEL PERFIL POR COMPETENCIAS.										
<ol style="list-style-type: none"> 1. Demostrar una comprensión profunda de los conceptos y principios fundamentales de física y química (pensando que las matemáticas son una herramienta). 14. Plantear, analizar y resolver problemas físicos, químicos y fisicoquímicos, tanto teóricos como experimentales, mediante la utilización de métodos analíticos, experimentales o numéricos. 15. Aplicar el conocimiento teórico de la Física, Química y Fisicoquímica en la realización de proyectos de ingeniería. 										

PRESENTACIÓN DE LA MATERIA

La Química Cuántica, para el Ingeniero Químico, debe ser una cátedra complementaria auxiliar en la comprensión de los conceptos básicos de química en base a formulaciones matemáticas del modelo atómico. Muchas de las ideas modernas en estructura, reactividad, enlace químico, propiedades periódicas y propiedades de elementos y compuestos están basadas en la nueva concepción del átomo moderno. Aunque si bien, la materia de Química Cuántica es profundamente teórica, posee un laboratorio evidente centrado en la espectroscopía molecular, cuyos conceptos son abordados, al menos en parte, en la materia de análisis instrumental y algunos otros cursos avanzados en el posgrado en ciencias.

RELACIÓN CON OTRAS MATERIAS DEL PLAN DE ESTUDIOS

El contenido de esta materia complementa las bases estudiadas en el curso de Química General con bases matemáticas más sólidas para la mejor comprensión del modelo atómico moderno. Esta materia tiene relación estrecha con:

Mecánica Clásica
 Algebra Lineal
 Electricidad y magnetismo
 Química General
 Ecuaciones diferenciales ordinarias
 Probabilidad y estadística
 Programación básica
 Métodos numéricos
 Cálculo diferencial
 Cálculo Integral
 Cálculo de varias variables

NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO:	1. Fundamentos de la mecánica cuántica.	TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA:	
--	---	---	--

COMPETENCIAS A DESARROLLAR	SABERES			EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO	
	CONOCIMIENTOS	HABILIDADES	ACTITUDES	DIRECTA	POR PRODUCTO
1. Conocer y comprender el desarrollo cognitivo de las ideas atomistas a través de la historia y la dirección hacia la creación de la Física	1. Desarrollo cronológico y epistemológico de los modelos atómicos: Dalton, Thomson, Rutherford. 2. El problema de la radiación del cuerpo negro.	Manejo de ecuaciones alusivas a cálculo diferencial e integral; así como a solución	<ul style="list-style-type: none"> • La organización de conceptos e ideas para la resolución de problemas de física moderna. 	<ul style="list-style-type: none"> • Ejercicios en clase • Participación y aporte de ideas en clase. 	<ul style="list-style-type: none"> • Tareas • Examen • Trabajo del tema

<p>2. Moderna. Comprender los modelos del átomo en función a los conocimientos científico/tecnológicos en su época.</p> <p>3. Conocer y comprender el modelo atómico moderno (donde el electrón-una partícula- es estudiada como una onda).</p>	<p>3. El efecto fotoeléctrico.</p> <p>4. El modelo atómico de Bohr.</p> <p>5. La teoría de dualidad onda/partícula.</p> <p>6. La ecuación de onda de Schödinger.</p> <p>7. El principio de incertidumbre.</p>	<p>de ecuaciones diferenciales.</p> <p>Comprensión y manejo de problemas de álgebra lineal.</p> <p>Conocimientos básicos de estadística.</p>	<ul style="list-style-type: none"> El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y análisis. 		
---	---	--	--	--	--

NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO:	1. Ecuación de onda y postulados de la mecánica cuántica.	TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA:	
--	---	---	--

COMPETENCIAS A DESARROLLAR	SABERES			EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO	
	CONOCIMIENTOS	HABILIDADES	ACTITUDES	DIRECTA	POR PRODUCTO
<p>1. Conocer las leyes de la mecánica ondulatoria.</p> <p>2. Aplicar las leyes de la mecánica ondulatoria a partículas pequeñas.</p> <p>3. Conocer el álgebra de operadores y su representación en términos de matrices, vectores y escalares.</p> <p>4. Conocer los tipos especiales de matrices (operadores) y las reglas de conmutación.</p>	<p>1. Los fundamentos de la mecánica ondulatoria de Maxwell.</p> <p>2. Resolución de la ecuación de onda y algunas aplicaciones clásicas.</p> <p>3. La ecuación de onda de Schrödinger.</p> <p>4. La ecuación de onda formulada como un problema de eigenvalores.</p> <p>5. Las funciones de onda tienen interpretación probabilística.</p> <p>6. Discusión de los postulados de la mecánica cuántica.</p>	<p>Manejo de ecuaciones alusivas a cálculo diferencial e integral; así como a solución de ecuaciones diferenciales.</p> <p>Comprensión y manejo de problemas de álgebra lineal.</p> <p>Conocimientos básicos de estadística.</p>	<ul style="list-style-type: none"> La organización de conceptos e ideas para la resolución de problemas de física moderna empleando matemáticas avanzadas. El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y análisis. 	<ul style="list-style-type: none"> Ejercicios en clase Participación en discusiones grupales. 	<ul style="list-style-type: none"> Tareas Examen del tema Trabajo del tema

NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO:	1. Aplicaciones de la mecánica cuántica a problemas sencillos.	TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA:	
--	--	---	--

COMPETENCIAS A DESARROLLAR	SABERES			EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO	
	CONOCIMIENTOS	HABILIDADES	ACTITUDES	DIRECTA	POR PRODUCTO
<ol style="list-style-type: none"> 1. Conocer y comprender el tratamiento cuántico de problemas físicos sencillos (previamente estudiados en mecánica clásica), con la correspondiente parametrización (cuantización) generada por restricciones matemáticas. 2. Comprender y aplicar el álgebra de operadores y ecuaciones de valores propios para resolución de problemas en física moderna. 3. Conocer y aplicar los polinomios de Legendre y de Hermite a problemas mecánico-cuánticos. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. La partícula en un pozo de potencial unidimensional con barreras infinitas. 2. La partícula en un pozo de potencial tridimensional con barreras infinitas. 3. La partícula en un anillo con barreras de potencial infinitas. 4. El oscilador armónico. 5. El rotor rígido en varias dimensiones. Análisis de la conmutabilidad del operador de momento angular. 	<p>Manejo de conceptos básicos de mecánica cuántica.</p> <p>Trabajo con álgebra de operadores. Integrales y derivadas.</p> <p>Manejo y análisis de resultados.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • El desarrollo de una perspectiva racional del comportamiento de la materia en escala submicroscópica. • El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y análisis. 	<ul style="list-style-type: none"> • Ejercicios en clase • Participación en clase 	<ul style="list-style-type: none"> • Tareas • Exámenes • Trabajo del tema

NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO:	4. Métodos aproximados.	TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA:	
---	-------------------------	--	--

COMPETENCIAS A DESARROLLAR	SABERES			EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO	
	CONOCIMIENTOS	HABILIDADES	ACTITUDES	DIRECTA	POR PRODUCTO
<ol style="list-style-type: none"> Conocer los fundamentos y aplicaciones de los diferentes métodos aproximados existentes en mecánica cuántica. Comprender y aplicar el método variacional y la teoría de perturbaciones a sistemas modelo. Comprender las ventajas del uso de gaussianas para representar orbitales atómicos (tal como, moleculares). 	<ol style="list-style-type: none"> La teoría de perturbaciones. El método variacional. El determinante secular. Funciones de prueba. Las funciones base tipo gaussiano. Ventajas y limitaciones. 	<p>Capacidad para comprender el análisis matemático y numérico desarrollado en base a ecuaciones de valores propios en álgebra lineal.</p> <p>Expresión de la ecuación de onda de Schrödinger de sistemas polieletrónicos o moléculas como una ecuación matricial de eigenvalores y eigenvectores.</p>	<ul style="list-style-type: none"> La organización y distribución de trabajos y proyectos en equipos de trabajo. El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y análisis. El interés por las propiedades de los materiales que nos rodean en base a operadores matemáticos que los describen. 	<ul style="list-style-type: none"> Ejercicios en clase. Participación en clase. 	<ul style="list-style-type: none"> Tareas Examen Trabajo del tema

NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO:	5. El modelo atómico moderno.	TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA:	
---	-------------------------------	--	--

COMPETENCIAS A DESARROLLAR	SABERES			EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO	
	CONOCIMIENTOS	HABILIDADES	ACTITUDES	DIRECTA	POR PRODUCTO
<ol style="list-style-type: none"> Conocer, comprender y manejar la ecuación de onda para el átomo de hidrógeno y resolverla para el contraste con los resultados previos de Bohr. Obtener los niveles energéticos (eigenvalores) y las funciones de onda u orbitales (eigenvectores) de la resolución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno. Describir los principios y reglas como: Pauli, Hund, AufBau, etc. En base a los resultados mecánico-cuánticos del sistema atómico. Visualizar la imposibilidad de una resolución de la ecuación de Schrödinger para átomos polielectrónicos y moléculas. Conocer el momento angular de spin del electrón y sus acoplamiento con el momento angular del átomo. Conocer el método aproximado de Hartree-Fock para resolución de sistemas químicos complejos. Conocer y aplicar el uso de la simetría molecular en la representación de las funciones de onda. 	<ol style="list-style-type: none"> La ecuación de onda para el átomo de hidrógeno puede ser resuelta de manera exacta. Los orbitales tipo s son esféricamente simétricos. Existen 3 tipos de orbitales p para cada valor cuántico de n. Los niveles degenerados de energía del átomo de hidrógeno son desdoblados en presencia de campos magnéticos: Efecto Zeeman. La ecuación de Schrödinger de átomos poli-electrónicos no puede resolverse de manera exacta. El electrón posee un momento de spin angular intrínseco. El método de Hartree-Fock resuelto por el método autoconsistente. Funciones de onda electrónica antisimétricas. Uso de teoría de grupos aplicada a orbitales moleculares. 	<p>Manejo de las ecuaciones de valores propios y los polinomios de Legendre.</p> <p>Manejo de los polinomios de Laguerre.</p> <p>Habilidad para el manejo y operaciones con vectores.</p> <p>Capacidad de análisis para describir los resultados mecánico-cuánticos en términos físicos.</p>	<ul style="list-style-type: none"> El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive. La organización y distribución de trabajos y proyectos en equipos de trabajo. El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y análisis. 	<ul style="list-style-type: none"> Ejercicios en clase Participación y discusión de temas. 	<ul style="list-style-type: none"> Tareas Examen Trabajo del tema

NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO:	6. Moléculas (Teoría de enlace-valencia vs. Teoría de orbitales moleculares).	TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA:	
--	---	---	--

COMPETENCIAS A DESARROLLAR	SABERES			EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO	
	CONOCIMIENTOS	HABILIDADES	ACTITUDES	DIRECTA	POR PRODUCTO
1. Conocer, entender y visualizar la aproximación de Born-Oppenheimer y sus consecuencias. 2. Contrastar las dos teorías fundamentales para la descripción del enlace químico. 3. Comprender y generar estructuras químicas en base a la teoría de enlace de valencia, y la correspondiente predicción de la Teoría de Orbitales Moleculares. 4. Comprender el tema de excitaciones electrónicas en sistemas aromáticos. 5. Conocer la familia de métodos de estructura electrónica semi-empíricos, con énfasis en el método de Hückel.	1. La aproximación de Born-Oppenheimer. 2. La teoría del enlace-valencia en la descripción del enlace químico. 3. El tratamiento de la teoría de orbitales moleculares al problema de la molécula de H ₂ . 4. Los estados electrónicos de moléculas diatómicas. 5. Geometría molecular. Estructuras de Lewis. Orbitales moleculares híbridos. 6. Hidrocarburos aromáticos tratados por la aproximación de electrones pi. 7. El método de Hückel	Elaboración de las estructuras de Lewis con fundamentos químicos. Análisis de estructura molecular en base al modelo VSEPR. Elaboración y análisis de diagramas de Walsh. Habilidad para la generación de orbitales moleculares en base a CLOA. Álgebra matricial.	<ul style="list-style-type: none"> La organización y distribución de trabajos y proyectos en equipos de trabajo. El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y análisis. 	<ul style="list-style-type: none"> Ejercicios en clase 	<ul style="list-style-type: none"> Tareas Examen Trabajo del tema Reportes de laboratorio (uno por práctica) Bitácora

NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO:	7. Espectroscopía molecular.	TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA:	
---	------------------------------	--	--

COMPETENCIAS A DESARROLLAR	SABERES			EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO	
	CONOCIMIENTOS	HABILIDADES	ACTITUDES	DIRECTA	POR PRODUCTO
<ol style="list-style-type: none"> 1. Conocer y comprender la aplicación de la aproximación de Born-Oppenheimer para la separación de la función de onda molecular. 2. Aplicar el modelo del rotor rígido a sistemas moleculares en base a su centro de masas. 3. Aplicar el modelo del oscilador armónico a los distintos modos normales de vibración de los sistemas moleculares. 4. Comprender las reglas de selección espectroscópicas en base a simetría. 5. Conocer los factores que contribuyen a la intensidad relativa de las líneas espectrales. 6. Comprender la dependencia de la resolución espectral en base a la concentración de la muestra y las interacciones moleculares. 7. Conocer el principio de Franck-Condon y como contribuye a la predicción de intensidad de líneas vibrónicas. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Las diferentes regiones del espectro electromagnético. 2. La aproximación de born-Oppenheimer parte la función de onda molecular en Vibracional y Rotacional. 3. El rotor rígido: El modelo más simple para rotaciones moleculares. 4. El oscilador armónico: El método más simple para vibraciones moleculares. 5. Reglas de selección en ambas espectroscopías, derivadas de la eca. De Schrödinger dependiente del tiempo. 6. Intensidad de las líneas y aspecto de los espectros. 7. Los espectros electrónicos poseen información vibracional y rotacional, dependiendo de su resolución. 8. El principio de Franck-Condon. 	<p>Manejo del modelo del rotor rígido.</p> <p>Manejo del modelo del oscilador armónico.</p> <p>Habilidad en el análisis matemático de datos.</p> <p>Interés por el análisis espectral de moléculas.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • La organización y distribución de trabajos y proyectos en equipos de trabajo. • El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y análisis. • El desarrollo de una perspectiva racional de la interacción de la luz con la materia y las manifestaciones cuánticas que los resultados revelan. 	<ul style="list-style-type: none"> • Ejercicios en clase • Desempeño en el laboratorio 	<ul style="list-style-type: none"> • Tareas • Examen • Trabajo del tema • Reportes de laboratorio (uno por práctica) • Bitácora

ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (Sugeridas)

- Involucrar a los estudiantes que elaboren un trabajo de investigación/análisis de un tema específico por bloque temático.

RECURSOS Y MATERIALES DIDÁCTICOS (Sugeridos)

Cañón, Lap-top, Proyector de acetatos, Pintarrón, Instrumentación analítica.

Materiales didácticos:

Leer la bibliografía básica, sugerir trabajos en equipo y la presentación de los mismos al grupo, consultar la web para búsqueda de información en prácticas de laboratorio, etc.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

EVALUACIÓN:

Será continua y permanente y se llevará a cabo en 2 momentos:

Formativa: Participación en clase, tareas.

Sumaria: Exámenes escritos, exámenes sorpresa, entrega de bitácora de laboratorio, autoevaluación, co-evaluación.

PONDERACIÓN (SUGERIDA):

Tareas	100 puntos
Examen 1 ^a	80 puntos
Examen 2 ^a	80 puntos
Examen Final (Global)	100 puntos
Presentación en grupo	50 puntos
Autoevaluación	15 puntos
Co-evaluación	<u>15 puntos</u>
TOTAL	440 puntos

Notas:

- a) Los exámenes parciales tienen una puntuación máxima de 80 puntos cada uno; no obstante, el alumno tendrá la oportunidad de recuperar la mitad de los puntos perdidos en la evaluación escrita en un examen oral con el profesor. La calificación del examen final escrito será definitiva.

FUENTES DE INFORMACIÓN

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA:

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

<ol style="list-style-type: none"> 1. Levine, Ira N., Quantum Chemistry, 5^a ed, New Jersey, Prentice Hall, 1999. 2. McQuarrie, Donald A. y Simon, John D., Physical Chemistry: A Molecular Approach, Sausalito, California, University Science Books, 1997. 3. Lowe, John P., Quantum Chemistry, 2a. ed, Academic Press, 1997. 4. Atkins, P. W. y Friedman, R. S., Molecular Quantum Mechanics, 3a. ed, Oxford, Oxford, 1997. 5. Pilar, F., Elementary Quantum Chemistry, NY, Dover, 1990. 6. Harris, D. C. y Bertolucci, M. D., Symmetry and Spectroscopy, NY, Dover, 1978. 7. McQuarrie, D. A., Quantum Chemistry, University Science Books, Mill Valley, CA. 1983. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Pauling L. and Wilson E. B. "Introduction to Quantum Mechanics with applications to chemistry", Dover publications, NY. 1963. 2. Szabo A. and Ostlund N. S. "Modern Quantum Chemistry", Dover publications, NY 1996. 3. Hollas J. M. "High resolution spectroscopy", Butterworths, UK 1982. 4. Fitts D. D. "Principles of Quantum Mechanics as applied to chemistry and chemical physics", Cambridge University Press, UK 1999.
	<p style="text-align: center;">OTRAS FUENTES DE INFORMACIÓN:</p>