



1. Información de la Unidad de Aprendizaje:

Nombre: Química Cuántica y Estadística		Número de créditos: 9	
Departamento: Química		Horas B.C.A. **: 64	Horas A.M.I.***: 80 Total de horas: 144
Tipo *: C	Prerrequisitos: Ninguno		Nivel: Formación Optativa Abierta

* C=Curso, S=Seminario, CT=Curso Taller, T=Taller, L=Laboratorio, N=Clínica

**B.C.A. Bajo conducción académica.

***A.M.I. Actividades de manera independiente

2. Descripción

Estudio de los principios básicos de la mecánica cuántica y su aplicación a problemas a la química, debido a que esta rama de la física provee los elementos básicos para describir el comportamiento de partículas pequeñas tales como átomos y moléculas; también permite racionalizar la reactividad química y el comportamiento que da origen a las técnicas espectroscópicas.

3. Objetivo general

Comprender los postulados de la mecánica cuántica y aplicar la ecuación de Schrödinger a problemas modelo que involucran un solo electrón (partícula en la caja, oscilador armónico, rotor rígido y átomo de hidrógeno) y problema multi electrónico (soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger).

4. Contenido temático

UNIDAD 1. Mecánica Cuántica	
Objetivo específico: Presentar los fundamentos básicos de la mecánica cuántica y la solución de la ecuación de Schrödinger en problemas modelo de una sola partícula y su relación con técnicas espectroscópicas.	
Contenido de unidad 1.1 Álgebra de operadores. 1.2 Postulados de la mecánica cuántica. 1.3 La ecuación de Schrödinger. 1.4 La partícula libre. 1.5 La partícula en la caja con potencial finito e infinito. 1.6 El oscilador armónico. 1.7 Rotor rígido 1.8 Momento angular	N° Sesiones: 6 horas/semana: 4
UNIDAD 2. Método multielectrónicos	
Objetivo específico: Presentar las diferentes aproximaciones para resolver la ecuación de Schrödinger para sistemas finitos que contienen más de un electrón tales como átomos, moléculas y nanopartículas.	
Contenido de unidad 2.1 Aproximación Born-Oppenheimer. 2.1 Determinante de Slater. 2.2 Método de Campo autoconsistente de Hartree-Fock.	N° Sesiones: 6 horas/semana: 4

2.3 Métodos post-Hartree-Fock 2.3.1 Método Coupled-Cluster. 2.3.2 Método de perturbación de Moller-Plesset. 2.3.3 Configuración de Interacciones. 2.4 Teoría de los funcionales de la densidad.	
---	--

UNIDAD 3. Principios de mecánica estadística.

Objetivo específico: Enlazar el comportamiento cuántico o propiedades de un sola molécula con el comportamiento en escala macroscópicas.

Contenido de unidad 3.1 Ensamblés en mecánica estadística. 3.2 Termodinámica estadística clásica. 3.3 Modelos clásicos 3.4 Modelos cuánticos. 3.4.1 Ensamblés en mecánica cuántica estadística. 3.4.2 Gas ideal de Bose. 3.4.3 Condensación de Bose-Einstein.	N° Sesiones: 4 horas/semana: 4
---	---

5. Modalidades de enseñanza aprendizaje

Las modalidades del proceso de enseñanza-aprendizaje y, en su caso, las de investigación

- Exposición de temas por parte del profesor.
- Resolución de ejercicios que propicien la reflexión y el trabajo cooperativo en el aula.
- Lecturas de artículos que contengan aplicaciones de los conceptos aprendidos

6. Modalidad de evaluación

Evaluación continua:

Mecanismo	Porcentaje
3 exámenes parciales	70
Tareas	20
Participación en clase	10

7. Bibliografía

Título	Autor	Editorial, fecha	Año de la edición más reciente
Molecular Quantum Mechanics	Peter W Atkins,, Ronald S Friedman	Oxford University Press, USA; Edición: 5th ed. (2010)	2010
Química Cuántica - 5 Edición	Ira N. Levine	Prentice Hall (1 de octubre de 2001)	2001
Statistical Mechanics: A Concise Introduction for Chemists	B Widom	Cambridge University Press (18 de abril de 2002)	2002

8. Otros materiales de apoyo

Curso en línea titulado **Statistical Mechanics**
http://www.nyu.edu/classes/tuckerman/stat.mech/lectures/lecture_13/lecture_13.html

9. Conocimientos aptitudes y capacidades que el alumno deberá adquirir

Conocimiento de principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
Aplicación de conocimientos de Matemáticas

10. Perfil académico sugerido para el docente

Se sugiere el curso para alumnos que hayan tomado el curso de matemáticas aplicadas a la química

11. Autores

Dr. Bernardo Antonio Zúñiga Gutiérrez

Formato basado en el Artículo 21 del Reglamento General de planes de estudios de la U.de G.