UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

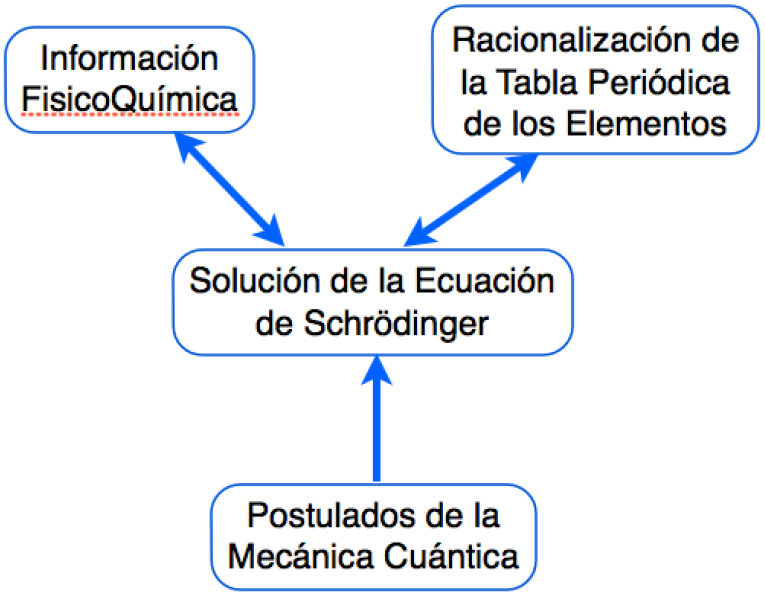
1. DATOS GENERALES DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE (UA) O ASIGNATURA			
Nombre de la Unidad de Aprendizaje (UA) o Asignatura			**Clave de la UA**
Química Cuántica			I7482
Modalidad de la UA	**Tipo de UA**	**Área de formación**	**Valor en créditos**
Escolarizada	Curso	Básica Particular Obligatoria	9
UA de pre-requisito	**UA simultaneo**	**UA posteriores**	
Estructura Molecular, Cálculo	Ecuaciones Diferenciales	Espectroscopía	
Horas totales de teoría	**Horas totales de práctica**	**Horas totales del curso**	
68	0	68	

Licenciatura(s) en que se imparte	**Módulo al que pertenece**
Licenciatura en Química	M1. Estructura de la Materia
Departamento	**Academia a la que pertenece**
Química	Química Inorgánica
Elaboró	**Fecha de elaboración o revisión**
Dr. Mario U. Delgado Jaime Dr. Roberto Flores Moreno Dr. Víctor M. Soto Dr. Bernardo Zúñiga	29/06/2017

<table>
<tr><th colspan="3">2. DESCRIPCIÓN DE LA UA O ASIGNATURA</th></tr>
<tr><th colspan="3">Presentación</th></tr>
<tr><td colspan="3">La presente Unidad de Aprendizaje (UA) favorece el desarrollo de competencias de la Licenciatura en Química (LQ) a partir del conocimiento teórico de los los principios de la Química Cuántica. Comprenderá la importancia de esta disciplina en el desarrollo de la investigación química moderna.
Adquirirá la habilidad de resolver problemas y ponderará la influencia de la Química Cuántica en la comprensión de los fenómenos químicos y físicos (reacciones químicas, cambios de fase, adsorción, catálisis, espectroscopía)</td></tr>
<tr><th colspan="3">Relación con el perfil</th></tr>
<tr><th colspan="2">Modular</th><th>De egreso</th></tr>
<tr><td colspan="2">La UA provee el conocimiento fundamental del módulo, “Estructura de la Materia”, ya que la química cuántica es la herramienta más robusta que existe en la ciencia para explicar la estructura de los átomos, los enlaces de estos para formar moléculas, cúmulos y sólidos. También provee de las bases para el estudio de la espectroscopia, que es una de las herramientas modernas experimentales para estudiar los diferentes materiales.</td><td>El profesional de la química tendrá una alta capacidad para identificar la técnica más adecuada para la caracterización de materiales. Así como una gran habilidad para detectar errores en una técnica de análisis. También será capaz de elucidar la funcionalidad de los compuestos que trabaje y sugerir la síntesis de los más adecuados.</td></tr>
<tr><th colspan="3">Competencias a desarrollar en la UA o Asignatura</th></tr>
<tr><th>Transversales</th><th>Genéricas</th><th>Profesionales</th></tr>
<tr><td>• Enumera los postulados teóricos
• Obtiene información física desde elementos matemáticos
• Resuelve problemas
• Genera información física de un sistema desde la solución del problema.</td><td>• Analiza los postulados de la mecánica cuántica, para interpretar la información generada.
• Interpreta los resultados de la solución de la ecuación de Schrödinger</td><td>• Aporta la ayuda teórica para el posterior manejo de materiales químicos.</td></tr>
<tr><th colspan="3">Saberes involucrados en la UA o Asignatura</th></tr>
<tr><th>Saber (conocimientos)</th><th>Saber hacer (habilidades)</th><th>Saber ser (actitudes y valores)</th></tr>
</table>

• Postulados de la Mecánica Cuántica • Partícula en la caja • Oscilador armónico • Rotor Rígido • Átomo de Hidrógeno • Métodos de campo medio para sistemas polielectrónicos	• Resuelve la Ecuación de Schrödinger de diferentes maneras • Comprende los diferentes métodos de resolución y sugiere cambios.	• Observa y comparte la información para el trabajo en equipo • Gestiona su aprendizaje y aplica el conocimiento teórico para los procesos químicos.

3. ORGANIZADOR GRÁFICO DE LOS CONTENIDOS DE LA UA O ASIGNATURA



4. SECUENCIA DEL CURSO POR UNIDADES TEMÁTICAS

Unidad temática 1: Postulados de la Mecánica Cuántica

Objetivo de la unidad temática: Comprender los postulados de la Mecánica Cuántica.
Introducción: Los postulados de la mecánica cuántica son la parte fundamental y básica para el estudio de la química cuántica. Su importancia es tal que si se desea un progreso real en el estudio de esta asignatura, se deben comprender estos postulados. Son las reglas básicas de esta disciplina.

Contenido temático	Saberes involucrados	Producto de la unidad temática
1. Postulados de la Mecánica Cuántica	• Comprende realmente cada uno de los postulados de la Mecánica Cuántica.	•Tarea •Examen

Actividades del docente	Actividades del estudiante	Evidencia de la actividad	Recursos y materiales	Tiempo destinado
Expone los temas de manera didáctica apoyandose de diversas fuentes. Proporciona y sugiere lecturas adicionales.	Resuelve actividades en clase	•Participa en la clase	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Exposición con cañon • Libros de texto	2 horas
Resuelve y corrige las tareas frente a los estudiantes para un mejor aprendizaje. Promueve el análisis de artículos científicos.	Entrega tareas en físico	• Tarea entregada	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Artículos. • Libros de texto	2 horas
Elabora el exámen	Resuelve el exámen	• Entrega examen	Hoja de examen	2 horas

Unidad temática 2: Partícula en la caja

Objetivo de la unidad temática: Comprender la información que se obtiene al resolver el problema de la partícula en la caja.
Introducción: La partícula en la caja, con sus diversas condiciones y soluciones, nos da la oportunidad de comenzar a familiarizarnos con los problemas de la química cuántica. También podremos ver como se obtiene información física desde la solución matemática. Además podremos apreciar como este modelo tan sencillo tiene aplicaciones prácticas en espectroscopia.

Contenido temático	Saberes involucrados	Producto de la unidad temática

2.1 Partícula libre 2.2 Partícula confinada 2.2.1 Barreras finitas de potencial 2.2.2 Efecto tunel 2.2.3 Barreras infinitas de potencial 2.2.4 Cuantización 2.3 Obtención de información fisicoquímica de los sistemas a partir de los Postulados de la Mecánica Cuántica	• Entiende la manera de resolver el problema de la partícula libre y sus diferentes condiciones • Aprende a obtener la información de la solución matemática del problema de la partícula libre	• Tarea • Exámen

Actividades del docente	**Actividades del estudiante**	**Evidencia de la actividad**	**Recursos y materiales**	**Tiempo destinado**
Expone los temas de manera didáctica apoyandose de diversas fuentes. Proporciona y sugiere lecturas adicionales.	Resuelve actividades en clase	•Participa en la clase	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Exposición con cañon • Libros de texto	4 horas
Resuelve y corrige las tareas frente a los estudiantes para un mejor aprendizaje. Promueve el análisis de artículos científicos.	DESARROLLO: Entrega tareas en físico	• Tarea entregada	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Artículos. • Libros de texto	4 horas
Elabora el exámen	CIERRE: Resuelve el exámen	• Entrega examen	Hoja de examen	2 horas

Unidad temática 3: Oscilador Armónico

Objetivo de la unidad temática: Conocer el oscilador armónico y desarrollar el criterio de su aplicabilidad
Introducción: El oscilador armónico es una de las herramientas que nos permiten aproximarnos al conocimiento de los enlaces, y las vibraciones moleculares. Se debe tener el criterio de las limitaciones de este modelo que nos abre la posibilidad de conocer nuevas formas de resolver la ecuación de Schrödinger.

Contenido temático	**Saberes involucrados**	**Producto de la unidad temática**
3.1 Aproximación de Born-Oppenheimer 3.2 Naturaleza aproximada del potencial armónico y su intervalo de aplicabilidad 3.3 Ecuacion diferencial de Hermite, polinomios de Hermite y cuantización 3.4 Vibración perene de las moléculas	• Comprende la importancia de las aproximaciones en el modelado, así como los límites de las consideraciones. • Aprende nuevos métodos de solución de ecuaciones.	• Tarea • Exámen

Actividades del docente	**Actividades del estudiante**	**Evidencia o de la actividad**	**Recursos y materiales**	**Tiempo destinado**

Expone los temas de manera didáctica apoyandose de diversas fuentes. Proporciona y sugiere lecturas adicionales.	INICIO:Resuelve actividades en clase	•Participa en la clase	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Exposición con cañon • Libros de texto	6 horas
Resuelve y corrige las tareas frente a los estudiantes para un mejor aprendizaje. Promueve el análisis de artículos científicos.	DESARROLLO: Entrega tareas en físico	• Tarea entregada	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Artículos. • Libros de texto	6 horas
Elabora el exámen	CIERRE: Resuelve el exámen	• Entrega examen	Hoja de examen	2 horas

Unidad temática 4: Rotor rígido

Objetivo de la unidad temática: Comprenderá el concepto del rotor rígido
Introducción: El concepto de rotor rígido nos permite modelar mejor aún el comportamiento molecular. Esta es la base de algunas espectroscopías, por eso de la importancia de que se conozca este modelo.

Contenido temático	**Saberes involucrados**	**Producto de la unidad temática**
4.1 Operador de momentum angular, L^2 4.2 Armonico esféricos como eigenfunciones de L^2 4.3 Ecuacion de Legendre y cuantizacion. Polinomios de Legendre. 4.4 Principio de incertidumbre, conmutadores y operadores L_X,L_Y y L_Z	• Comprende la importancia del modelo de rotor rígido en cuanto nos permite encontrar información molecular de la solución de la ecuación de Schrödinger. • Aprende a resolver en diferentes coordenadas y a interpretar la información a partir de sus soluciones numéricas	• Tarea • Exámen

Actividades del docente	**Actividades del estudiante**	**Evidencia o de la actividad**	**Recursos y materiales**	**Tiempo destinado**
Expone los temas de manera didáctica apoyandose de diversas fuentes. Proporciona y sugiere lecturas adicionales.	INICIO:Resuelve actividades en clase	•Participa en la clase	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Exposición con cañon • Libros de texto	6 horas
Resuelve y corrige las tareas frente a los estudiantes para un mejor aprendizaje. Promueve el análisis de artículos científicos.	DESARROLLO: Entrega tareas en físico	• Tarea entregada	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Artículos. • Libros de texto	6 horas
Elabora el exámen	CIERRE: Resuelve el exámen	• Entrega examen	Hoja de examen	2 horas

Unidad temática 5: Átomo de hidrógeno

Objetivo de la unidad temática: Resolver el átomo de hidrógeno
Introducción: La solución del átomo de hidrógeno es la base para poder entender al átomo y a los orbitales atómicos. Es por eso de la importancia de tomar este tema con seriedad. La solución nos genera la posibilidad de entender el orden que se presenta en la tabla periódica.

Contenido temático	Saberes involucrados	Producto de la unidad temática
5.1 Solución exacta del átomo de hidrógeno, polinomios de Laguerre 5.2 Racionalización de la Tabla Periódica en función de la solución encontrada en (5.1) 5.3 Degeneración de orbitales P, hibridación 5.4 Átomos hidrogenoides	• Comprende la resolución del átomo de hidrógeno y las consecuencias que esto nos da. • Aprende acerca de el orden presentado a partir de la información que se obtiene de resolver al átomo de hidrógeno.	• Tarea • Exámen

Actividades del docente	Actividades del estudiante	Evidencia o de la actividad	Recursos y materiales	Tiempo destinado
Expone los temas de manera didáctica apoyandose de diversas fuentes. Proporciona y sugiere lecturas adicionales.	INICIO:Resuelve actividades en clase	• Participa en clase	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Exposición con cañon • Libros de texto	6 hora
Resuelve y corrige las tareas frente a los estudiantes para un mejor aprendizaje. Promueve el análisis de artículos científicos.	DESARROLLO: Entrega tareas en físico	• Tarea entregada	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Artículos. • Libros de texto	4 horas
Elabora el exámen	CIERRE: Resuelve el exámen	• Entrega examen	Hoja de examen	2 hora

Unidad temática 6: Métodos de campo medio para sistemas polielectrónicos

Objetivo de la unidad temática: Conocerá algunos métodos para los sistemas polielectrónicos.
Introducción: Es importante que el estudiante conozca más métodos de solución de sistemas diversos. En este caso los sistemas polielectrónicos son como el puente que queda tendido, para cursos posteriores más avanzados.

Contenido temático	Saberes involucrados	Producto de la unidad temática
6.1 Principio variacional 6.2 Método de Hückel, orbital molecular 6.3 Aproximación de Hartree 6.4 Principio de antisimetría, principio de exclusión de Pauli y método Hartree-Fock 6.5 Teoremas de Hohenberg y Kohn y metodo de Kohn-Sham	• Comprende diferentes métodos para resolver los sistemas polielectrónicos. • Entiende la importancia y las limitaciones de cada método.	• Tarea • Exámen

Actividades del docente	Actividades del estudiante	Evidencia o de la actividad	Recursos y materiales	Tiempo destinado
Expone los temas de manera didáctica apoyandose de diversas fuentes. Proporciona y sugiere lecturas adicionales.	INICIO:Resuelve actividades en clase	• Participa en clase	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Exposición con cañon • Libros de texto	6 hora
Resuelve y corrige las tareas frente a los estudiantes para un mejor aprendizaje. Promueve el análisis de artículos científicos.	DESARROLLO: Entrega tareas en físico	• Tarea entregada	• Materiales simples de papelería(pintarrón, marcadores, borrador, hojas) • Artículos. • Libros de texto	4 horas
Elabora el exámen	CIERRE: Resuelve el exámen	• Entrega examen	Hoja de examen	2 hora

5. EVALUACIÓN Y CALIFICACIÓN

Requerimientos de acreditación:

La mínima calificación probatoria es de 60.

Criterios generales de evaluación:

El alumno deberá cubrir el 80% de las asistencias totales al curso para poder obtener la calificación ordinaria mínima de 60. Además se toman en cuenta la calificación obtenida de todos los exámenes realizados y las tareas entregadas.

Evidencias o Productos

Evidencia o producto	Competencias y saberes involucrados	Contenidos temáticos	Ponderación
Tareas	• Adquiere la capacidad de investigar y de resolver problemas	Todas las unidades	10%
Exámenes parciales	• Demuestra el conocimiento obtenido en la solución de exámenes	Todas las unidades	80%
Examen Final	• Demuestra el conocimiento obtenido en la solución de exámenes	• Todas las unidades	10%

6. REFERENCIAS Y APOYOS				
Referencias bibliográficas				
Referencias básicas				
Autor (Apellido, Nombre)	**Año**	**Título**	**Editorial**	**Enlace o biblioteca virtual donde esté disponible (en su caso)**
Donald A. McQuarrie, John D. Simon.	1997	Physical Chemistry: A Molecular Approach.	University Science Books. Sausalito CA	
Ira N. Levine	2009	Quantum Chemistry	Pearson Prentice Hall New Jersey	
Referencias complementarias				
Apoyos (videos, presentaciones, bibliografía recomendada para el estudiante)				
https://ocw.mit.edu/courses/chemistry/5-73-introductory-quantum-mechanics-i-fall-2005/				