



1) NOMBRE DE CADA CURSO O ACTIVIDAD CURRICULAR

A) MECÁNICA CUÁNTICA MOLECULAR

B) DATOS BÁSICOS DEL CURSO

Semestre	Horas de teoría por semana	Horas de práctica por semana	Horas trabajo adicional estudiante	Créditos
6	5	0	5	10

C) OBJETIVOS DEL CURSO

Objetivos generales	Al finalizar el curso el estudiante será capaz de comprender los conceptos fundamentales de la mecánica cuántica y de las teorías modernas de la estructura atómica y molecular de la materia así como el uso de estos conceptos en el estudio de las propiedades físicas y químicas de los sistemas moleculares, incluidos los biomoleculares. Comprender a nivel descriptivo las técnicas espectroscópicas que miden estas propiedades, los métodos prácticos de la mecánica cuántica (métodos semiempíricos, de Hartree-Fock y de Funcionales de la Densidad).	
Objetivos específicos	Unidades	Objetivo específico
	1. Antecedentes históricos y conceptos preliminares.	Hacer un resumen histórico de la génesis de la mecánica cuántica y revisar algunas herramientas físicas y matemáticas que constituyen el lenguaje esencial en el cual plantear los principios de la física cuántica.
	2. Ecuación de Schrödinger.	Introducir la ecuación de Schrödinger e ilustrar su uso con la aplicación a una partícula en una caja unidimensional. Utilizar este ejemplo para introducir algunos conceptos fundamentales de la mecánica cuántica de manera informal e intuitiva.
	3. Postulados y principios generales de la mecánica cuántica.	Introducir los principios y postulados generales de la mecánica cuántica de manera formal y sistemática.
	4. Oscilador armónico cuántico.	Aplicar los principios generales al oscilador armónico y relacionar las propiedades de este sistema con propiedades de moléculas diatómicas y su espectro infrarrojo.
	5. Sistemas tridimensionales.	Introducir los conceptos de momento angular y aplicarlos a sistemas tridimensionales, como el de un rotor rígido y el electrón en el átomo de hidrógeno. Ver limitaciones (átomo de Helio).
	6. Métodos aproximados.	Introducir los métodos aproximados basados en la teoría de perturbaciones y en principios variacionales. Aplicación a átomos, en particular átomo de Helio.
	7. Moléculas	Aplicación de métodos aproximados a moléculas. Introducción de aproximaciones fundamentales y conceptos esenciales sobre enlace químico y orbitales moleculares.
8. Elementos de espectroscopía molecular.	Aplicar los resultados de capítulos previos a espectroscopía molecular.	



D) CONTENIDOS Y MÉTODOS POR UNIDADES Y TEMAS

5h/semana, 16 semanas: 80 h/semestre

Unidad 1 Antecedentes históricos y conceptos preliminares.	10 h
Tema 1.1 Descubrimiento del electrón, radiación del cuerpo negro, efecto fotoeléctrico.	2 h
Tema 1.2 Espectro atómico del hidrogeno. Formula de Rydberg	2 h
Tema 1.3 Momento angular del electrón en el átomo del hidrogeno.	2 h
Tema 1.4 Onda de De Broglie	1 h
Tema 1.5 Ecuación de onda, método de separación de variables, modos normales, superposición	2 h
Tema 1.6 Principio de incertidumbre de Heisenberg	1 h
Lecturas y otros recursos	Libros de texto y Artículos de divulgación
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro

Unidad 2. Ecuación de Schrödinger	10 h
Tema 2.1 Función de onda de una partícula. Problema de eigenvalores.	4 h
Tema 2.2 Operadores lineales en mecánica cuántica.	2 h
Tema 2.3 Función de onda. Interpretación probabilística.	2 h
Tema 2.4 Partícula en una caja.	2 h
Lecturas y otros recursos	Libros de texto y Artículos de divulgación
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro

Unidad 3. Postulados y principios generales de la Mecánica Cuántica.	10 h
Tema 3.1 Estados de un sistema y función de onda.	3 h
Tema 3.2 Operadores Mecánico-Cuánticos.	1 h
Tema 3.3 Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.	2 h
Tema 3.4 Eigenfunciones de operados hermiticos.	2 h
Tema 3.5 Conjunto ortonormal. Conmutador de dos operadores.	2 h
Lecturas y otros recursos	Libros de texto y Artículos de divulgación
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos. Experimentos demostrativos de los principios físicos relacionados con esta unidad
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro

Unidad 4. Oscilador armónico cuántico.	10 h
Tema 4.1 Niveles de energía.	2 h
Tema 4.2 Función de onda.	2 h
Tema 4.3 Modelo de moléculas diatómicas.	3 h
Tema 4.4 Espectro infrarojo de moléculas diatómicas.	3 h
Lecturas y otros recursos	Libros de texto y Artículos de divulgación
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos. Experimentos demostrativos de los principios físicos relacionados con esta unidad
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro



Unidad 5. Sistemas tridimensionales.		10 h
Tema 5.1 Partícula en una caja tridimensional.		2 h
Tema 5.2 Operador Laplaciano . Rotor rígido. Molécula diatómica rotante. Armónicos esféricos.		3 h
Tema 5.3 Operador de momento angular y átomo de Hidrogeno. Orbitales s y p		3 h
Tema 5.4 Átomo de Helio.		2 h
Lecturas y otros recursos	Libros de texto y Artículos de divulgación	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	

Unidad 6. Métodos aproximados.		10 h
Tema 6.1 Teoría de perturbación.		2 h
Tema 6.2 Método variacional. Funciones de prueba.		3 h
Tema 6.3 Átomo de Helio.		2 h
Tema 6.4 Ecuación de Hartree-Fock. Determinantes de Slater. Método del campo autoconsistente		3 h
Lecturas y otros recursos	Libros de texto y Artículos de divulgación	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	

Unidad 7. Moléculas		12 h
Tema 7.1 Aproximación de Born- Oppenheimer.		2 h
Tema 7.2 Descripción del enlace químico.		2 h
Tema 7.3 Integral de intercambio. Integral de traslape.		2 h
Tema 7.4 Estabilidad del enlace químico en H₂.		2 h
Tema 7.5 Orbitales Moleculares. Orbitales “Bondings” y “antibondings”.		2 h
Tema 7.6 Enlaces covalentes. Formulas de Lewis. Orbitales híbridos.		2 h
Lecturas y otros recursos	Libros de texto y Artículos de divulgación	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos. Experimentos demostrativos de los principios físicos relacionados con esta unidad	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	

Unidad 8. Elementos de espectroscopía molecular.		8 h
Tema 8.1 Espectro electromagnético.		2 h
Tema 8.2 Rotor rígido y oscilador armónico. Modelos de moléculas rotantes y vibrantes.		3 h
Tema 8.3 Distribución de Boltzmann y efectos de temperatura.		3 h
Lecturas y otros recursos	Libros de texto y Artículos de divulgación	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos. Experimentos demostrativos de los principios físicos relacionados con esta unidad	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	



E) ESTRATEGIAS DE ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE

- Exposición del maestro con apoyo de recursos visuales y audiovisuales
- Tareas previas y posteriores a cada tema
- Análisis de textos científicos y tecnológicos
- Evaluación de conceptos formales en exámenes parciales
- Evaluación de la capacidad de síntesis e integración del conocimiento mediante exámenes parciales

F) EVALUACIÓN Y ACREDITACIÓN

Elaboración y/o presentación	Periodicidad	Abarca	Ponderación
Primer examen parcial	1	Unidades 1 y 2	20%
Segundo examen parcial	1	Unidad 3	20%
Tercer examen parcial	1	Unidades 4 y 5	20%
Cuarto examen parcial	1	Unidad 6	20%
Examen ordinario	1	Unidades 7 y 8	20%
		TOTAL	100%

G) BIBLIOGRAFÍA Y RECURSOS INFORMÁTICOS

Textos básicos

-Quantum Chemistry, Donald A. McQuarrie. University Science Books (1983)

-Molecular Quantum Mechanics, P Atkins, R. Friedman. Oxford University Press (2005)

Textos complementarios

-Introduction to Quantum Mechanics, in Chemistry, Materials Science and Biology, S. M. Binder, Elsevier, Academic Press, (2004).

- Fundamentals of Quantum Chemistry, James E. House, Elsevier, Academic Press, (2004).

-Feynman Lectures on Physics, R. P. Feynman. Vol. 3.