



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías  
División de Ciencias Básicas  
**LICENCIATURA EN QUÍMICA**

**INFORMACIÓN DEL CURSO:**

<b>Nombre:</b> Química Cuántica		<b>Número de créditos:</b> 9	
<b>Departamento:</b> Química		<b>Horas teoría:</b> 68	<b>Horas práctica:</b> 0
		<b>Total de horas por cada semestre:</b> 68	
<b>Clave:</b> I7485	<b>NRC:</b>	<b>Tipo:</b> Curso	<b>Nivel:</b> Básica particular obligatoria <b>Se recomienda en el 05 semestre.</b>

**Antecedentes:**

**Pre-requisitos:** Algebra Lineal

**Co-requisitos:** Ecuaciones diferenciales ordinarias

**2. DESCRIPCIÓN**

**Objetivo General:**

Discutir los principios básicos de la mecánica cuántica y su aplicación a los problemas de la química que le permitan al estudiante realizar cálculos de las propiedades termodinámicas de los gases; calcular y entender las propiedades moleculares como longitudes de enlace, ángulos de enlace, momentos dipolares, barreras de rotación interna, diferencias de energía entre isómeros conformacionales, entre otras; a través de la interpretación de espectros moleculares.

En este curso se pretende también que el estudiante utilice los principios de la mecánica cuántica para describir la estructura electrónica de un átomo, lo que le permitirá entender las estructuras y reacciones entre los átomos y moléculas. Podrá utilizar un método mecanocuántico aproximado de la teoría del campo ligando y así predecir y explicar las propiedades de los iones complejos de los metales de transición.

**Contenido temático**

**1. Introducción de principios de la mecánica cuántica**

- 1.1 Planck: Radiación de cuerpo negro
- 1.2 Eistein: Efecto fotoeléctrico
- 1.3 De Broglie: Dualidad partícula-onda
- 1.4 Schrödinger: La ecuación de onda
- 1.5 Born: Interpretación de la función de onda
- 1.7 Heisemberg: Principio de incertidumbre

**2. Técnicas y aplicaciones elementales**

- 2.1 Operadores y observables
  - 2.1.1 Propiedades de los operadores
  - 2.1.2 Postulados de la mecanica cuantica
  - 2.1.3 Principio de correspondencia
  - 2.1.4 Formulacion de Hamiltonianos
- 2.1 Movimiento traslacional
  - 2.1.1 Partícula en una caja unidimensional
  - 2.1.2 La partícula en una caja tridimensional: degeneración
  - 2.1.3 Efecto de las condiciones de frontera
  - 2.1.4 Barrera de potencial: Efecto túnel
- 2.2 Movimiento vibracional
  - 2.2.1 El oscilador armónico
  - 2.2.2 Niveles de energía
  - 2.2.3 Funciones de onda
- 2.3 Movimiento Rotacional

2.3.1 Rotación en dos dimensiones

### 2.3.2 Rotación de tres dimensiones

## 3. Estructura electrónica de los átomos

3.1 Estructura y espectros del átomo de hidrógeno

3.1.1 Estructura de los átomos hidrogenoides

3.1.2 Orbitales atómicos y sus energías

3.2 Estructuras de átomos con varios electrones

3.2.1 La aproximación de Born-Oppenheimer

3.2.2 El átomo de helio: Correlación electrónica

3.2.3 Principios de antisimetría y de Pauli

3.2.4 Penetración y apantallamiento

3.2.5 Regla de Hund

3.2.6 El principio Auf-bau

3.3 Espectros de átomos complejos

3.3.1 Spin: Multiplicidad

3.3.2 Relatividad: Acoplamiento espín-orbital

3.3.3 Campo eléctricos: Efecto Stark

### 3.3.4 Campo magnético: Efecto Zeeman

## 4. Métodos de estructura electrónica molecular

4.1 Métodos variacionales

4.1.1 Principio variacional

4.1.2 Método de Hückel

4.1.3 Método de Hartree-Fock

4.1.4 Métodos multiconfiguracionales

4.2 Teoría de perturbaciones

4.2.1 Método RSPT

4.2.2 Partición de Moller-Plesset

## 3. BIBLIOGRAFÍA.

Enlistar la bibliografía básica y otros materiales de apoyo (material audiovisual, sitios de internet, etc.)

**P. W. Atkins**, *Physical Chemistry*, Sixth Edition, Oxford University Press (1999)

**P. Atkins and Ronald Fiedman**, *Molecular Quantum Mechanics*, Fourth Edition, Oxford University Press (2005).

**H. Haken and H. C. Wolf**, *Molecular physics and Elements of Quantum Chemistry: Introduction to Experiments and Theory*, Second Edition, Springer Verlag (2003)

**J. Michael Hollas**, *Modern Spectroscopy*, John Wiley & Sons Ltd. (1995)

**Ira L. Levine**, *Química Cuántica*, 5ª Edición, Pearson Educación, S. A., (2001)

**John P. Lowe**, *Quantum Chemistry*, Second Edition, Academic Press (1993)

**Donald A. McQuarry**, *Quantum Chemistry*, University Science Books (1983)