

Nombre de la entidad:	DIVISIÓN DE CIENCIAS E INGENIERÍAS, CAMPUS LEÓN
Nombre del Programa Educativo:	INGENIERÍA FÍSICA INGENIERÍA BIOMÉDICA INGENIERÍA QUÍMICA SUSTENTABLE LICENCIATURA EN FÍSICA

Nombre de la unidad de aprendizaje:	Química Cuántica	Clave:	III105033
-------------------------------------	-------------------------	--------	------------------

Fecha de aprobación:	13/06/2011	Elaboró:	Leonardo Álvarez Valtierra
Fecha de actualización:	05/05/2015		

Horas de acompañamiento al semestre:	72	Créditos:	5
--------------------------------------	----	-----------	----------

Horas de trabajo autónomo al semestre:	53	Docente: Horas/semana/semestre	4
--	----	--------------------------------	---

Caracterización de la Unidad de Aprendizaje							
Por el tipo del conocimiento	Disciplinaria		Formativa	X	Metodológica	Área del conocimiento:	INGENIERÍA E INDUSTRIA
Por la dimensión del conocimiento	Área General		Área Básica Común		Área Básica Disciplinar	Área de Profundización	X Área Complementaria
Por la modalidad de abordar el conocimiento	Curso	X	Taller		Laboratorio	Seminario	
Por el carácter de la materia	Obligatoria		Recursable		Optativa	Selectiva	Acreditable

Prerrequisitos	
Normativos	Ninguno
Recomendables	Estructura de la Materia, Mecánica Clásica y Ecuaciones Diferenciales.

Perfil del Docente:

Contribución de la Unidad de Aprendizaje al perfil de egreso del programa educativo:
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 Físicoquímica en la realización de proyectos de ingeniería.

Contextualización en el plan de estudios:

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.

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

Competencia de la Unidad de Aprendizaje:

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.

Contenidos de la Unidad de Aprendizaje:

- I. Fundamentos de la mecánica cuántica
- II. Ecuación de onda y postulados de la mecánica cuántica
- III. Aplicaciones de la mecánica cuántica a problemas sencillos
- IV. Métodos aproximados
- V. El modelo atómico moderno
- VI. Moléculas (Teoría de enlace-valencia vs. Teoría de orbitales moleculares)
- VII. Espectroscopia Molecular

Actividades de aprendizaje

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

Recursos y materiales didácticos

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

	<p>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, etc.</p>
--	--

<p>Productos o evidencias del aprendizaje</p> <ul style="list-style-type: none"> • Tareas • Examen • Trabajo del tema 	<p>Sistema de evaluación:</p> <p>EVALUACIÓN: Será continua y permanente y se llevará a cabo en 2 momentos: Formativa: Participación en clase, tareas. Sumaria: Exámenes escritos, exámenes sorpresa, autoevaluación, co-evaluación.</p> <p>PONDERACIÓN (SUGERIDA):</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="text-align: right;">Tareas</td> <td style="text-align: right;">100</td> </tr> <tr> <td>puntos</td> <td></td> </tr> <tr> <td style="text-align: right;">Examen 1a</td> <td style="text-align: right;">80 puntos</td> </tr> <tr> <td style="text-align: right;">Examen 2a</td> <td style="text-align: right;">80 puntos</td> </tr> <tr> <td style="text-align: right;">Examen Final (Global)</td> <td style="text-align: right;">100 puntos</td> </tr> <tr> <td style="text-align: right;">Presentación en grupo</td> <td style="text-align: right;">50 puntos</td> </tr> <tr> <td style="text-align: right;">Autoevaluación</td> <td style="text-align: right;">15</td> </tr> <tr> <td>puntos</td> <td></td> </tr> <tr> <td style="text-align: right;">Co-evaluación</td> <td style="text-align: right;">15</td> </tr> <tr> <td>puntos</td> <td></td> </tr> <tr> <td style="text-align: right;">TOTAL</td> <td style="text-align: right;">440 puntos</td> </tr> </table>	Tareas	100	puntos		Examen 1a	80 puntos	Examen 2a	80 puntos	Examen Final (Global)	100 puntos	Presentación en grupo	50 puntos	Autoevaluación	15	puntos		Co-evaluación	15	puntos		TOTAL	440 puntos
Tareas	100																						
puntos																							
Examen 1a	80 puntos																						
Examen 2a	80 puntos																						
Examen Final (Global)	100 puntos																						
Presentación en grupo	50 puntos																						
Autoevaluación	15																						
puntos																							
Co-evaluación	15																						
puntos																							
TOTAL	440 puntos																						

Fuentes de información	
Bibliográficas:	Otras:
<p>BÁSICA</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. McQuarrie, D. A., "Quantum Chemistry", University Science Books, Mill Valley, CA. 1983. 2. Levine, Ira N., "Quantum Chemistry", 5ª ed, New Jersey, Prentice Hall, 1999. 3. McQuarrie, Donald A. y Simon, John D., "Physical Chemistry: A Molecular Approach", Sausalito, California, University Science Books, 1997. 4. Lowe, John P., "Quantum Chemistry", 2nd edition, Academic Press, 1997. 5. Atkins, P. W. y Friedman, R. S., "Molecular Quantum Mechanics", 3rd edition, Oxford, Oxford, 1997. 6. Pilar, F., "Elementary Quantum Chemistry", NY, Dover, 1990. 7. Harris, D. C. y Bertolucci, M. D., "Symmetry and Spectroscopy", NY, Dover, 1978. <p>COMPLEMENTARIA</p> <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 	

<p>Quantum Chemistry", Dover publications, NY 1996.</p> <p>3. Hollas J. M. "High Resolution Spectroscopy", Butterworths, UK 1982.</p> <p>4. Fitts D. D. "Principles of Quantum Mechanics as Applied to Chemistry and Chemical Physics", Cambridge University Press, UK 1999.</p>	
--	--