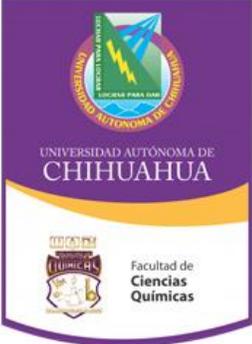


<p style="text-align: center;">UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p>  <p style="text-align: center;">FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS</p> <p style="text-align: center;">PROGRAMA DEL CURSO: QUÍMICA CUANTICA</p>	DES:	Ingeniería
	Programa(s) Educativo(s):	Maestría en Ciencias en Química
	Tipo de materia (Obli/Opta):	Obligatoria
	Clave de la materia:	105MQ
	Semestre:	segundo
	Área en plan de estudios (B, P, E):	P
	Créditos	6
	Total de horas por semana:	6
	<i>Teoría: Presencial o Virtual</i>	4
	<i>Laboratorio o Taller:</i>	2
	<i>Prácticas:</i>	
	<i>Trabajo extra-clase:</i>	4
	Créditos Totales:	
	Total de horas semestre (x 16 sem):	160
Fecha de actualización:	07/11/2016	
Prerrequisito (s):		

Propósito del curso : Integra eficazmente el lenguaje básico y los recursos matemáticos de la Química Cuántica en aplicaciones a escala nanométrica en el contexto profesional de la Química

COMPETENCIAS (Tipo y nombre de las competencias)	CONTENIDOS (Objetos de aprendizaje, temas y subtemas)	RESULTADOS DE APRENDIZAJE
<p>CG2: GESTIÓN DEL CONOCIMIENTO: Demuestra y conocimientos y habilidades para la búsqueda, análisis crítico, síntesis y procesamiento de información para su transformación en conocimiento con actitud ética.</p> <p>CG3: COMUNICACIÓN CIENTÍFICA. Difunde con responsabilidad ética y social el conocimiento científico, tecnológico, artístico y/o humanístico que produce de forma objetiva.</p> <p>CG4: INVESTIGACIÓN: Desarrolla investigación</p>	<p>1. Postulados de la Mecánica Cuántica</p> <ul style="list-style-type: none"> - Primer postulado: estado de un sistema cuántico. Función de onda: significado físico. Normalización y ortogonalidad. - Segundo postulado: operador asociado a toda variable observable. Álgebra de operadores. Operador energía: hamiltoniano. - Tercer postulado: ecuación de valores propios. Función propia y valor propio de un operador. Operadores hermíticos. - Cuarto postulado: valor medio de una propiedad (valor esperado). 	<p>1. Identifica y articula sus necesidades de conocimiento a partir de definir problemas de información relevante (1-CG2).</p> <p>2. Accede a diferentes fuentes de información (journal revistas científicas, bases de datos, índices, etc.) de calidad (2-CG2).</p> <p>3. Aplica los elementos fundamentales de la redacción científica (3-CG3).</p>

<p>original, tecnología y/o innovaciones en procesos, servicios o productos que contribuyan a la solución de problemas, mejoren la convivencia, generen oportunidades para el desarrollo sustentable y propicien una mejor calidad de vida.</p> <p>QUIM4 – QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL</p> <p>Aplica los fundamentos y métodos de la química teórica con énfasis en el modelado de fenómenos fisicoquímicos que permita dar respuesta a problemáticas del entorno en las áreas de salud, medio ambiente y energía.</p>	<ul style="list-style-type: none"> - Quinto postulado: evolución temporal del estado de un sistema cuántico. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. <p>2. Movimiento traslacional: la partícula en una caja</p> <ul style="list-style-type: none"> - La partícula en una caja monodimensional: Funciones de onda y niveles de energía. - Efecto túnel - La partícula en una caja bidimensional: Separación de variables y degeneración. - La partícula en una caja tridimensional <p>3. Movimiento vibracional: el oscilador armónico</p> <ul style="list-style-type: none"> - Descripción clásica. - Tratamiento cuántico. Funciones de onda: Polinomios de Hermite. Simetría de las funciones de onda. Energía de vibración: niveles energéticos. - El oscilador armónico como modelo de vibración de moléculas. 	<p>4. Muestra un desempeño abierto, sencillo, tolerante, congruente y objetivo al comunicar el saber científico (8-CG3).</p> <p>5. Muestra habilidad para la observación del fenómeno u objeto de estudio en su campo atencional (4-CG4).</p> <p>6. Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos (1-QUIM4).</p> <p>7. Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia (2-QUIM4).</p>
--	---	--

	<p>- Anarmonicidad</p> <p>4. Movimiento rotacional</p> <ul style="list-style-type: none"> - Descomposición del movimiento de dos partículas. - Tratamiento cuántico. <ul style="list-style-type: none"> Coordenadas esféricas. Movimiento de una partícula en una anillo. Funciones de onda: Polinomios de Legendre. Armónicos esféricos. Energía de rotación: niveles energéticos. - Cuantización del momento angular: Cuantización del módulo y del plano de giro. <p>5 Átomos hidrogenoides.</p> <ul style="list-style-type: none"> Hamiltoniano y resolución de la ecuación de Schrodinger. Unidades atómicas. Funciones de onda radial y angular. Niveles energéticos. - Función de onda (orbital atómico) y función de distribución radial. - Funciones de onda reales: representación radial y angular. - Efecto Zeeman 	<p>8. Construye el Hamiltoniano y escribe la ecuación de Schrödinger de sistemas polielectrónicos (6-QUIM4).</p>
--	---	--

OBJETO DE APRENDIZAJE	METODOLOGIA (Estrategias, secuencias, recursos didácticos)	EVIDENCIAS DE APRENDIZAJE
<p>Postulados de la Mecánica Cuántica</p> <p>Identifica y articula sus necesidades de conocimiento a partir de definir problemas de información relevante (CG2). Aplica los elementos fundamentales de la redacción</p>	<p>Clase magistral del profesor. A continuación, desarrollo por el alumno de cartografías conceptuales.</p> <p>Uso de técnicas del método de Aprendizaje basado en problemas.</p>	<p>Reporte por escrito al final del tema que demuestre el dominio de los conceptos básicos de la mecánica cuántica y la necesidad de esta para la descripción de fenómenos que la teoría clásica falla en describir.</p>

<p>científica (CG3).</p> <p>Movimiento traslacional: la partícula en una caja Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos (QUIM4).</p> <p>Movimiento vibracional: el oscilador armónico Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia (QUIM4).</p> <p>Movimiento rotacional Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos (QUIM4).</p> <p>Muestra habilidad para la observación del fenómeno u objeto de estudio en su campo atencional (CG4).</p> <p>Átomos hidrogenoides. Construye el Hamiltoniano y escribe la ecuación de Schrödinger de sistemas polieletrónicos (QUIM4).</p> <p>Accede a diferentes fuentes de</p>	<p>Trabajo en equipo para la elaboración de resúmenes.</p> <p>Trabajo en equipo para la integración del contenido de la asignatura en un material educativo novedoso.</p> <p>Aprendizaje basado en proyectos.</p>	<p>Presentación electrónica y exposición de un tema que muestre como el modelo teórico es aplicable a la descripción de sistemas con aplicación tecnológica (puntos cuánticos, transistores de efecto túnel resonante, etc.)</p> <p>Reporte por escrito que muestre el dominio del concepto de cuantización de los niveles energéticos y su aplicación en la descripción de espectros atómicos.</p> <p>Cuestionarios autoevaluados y corregidos que demostrarán que el alumno es capaz de hacer uso de los conceptos básicos de la química cuántica para la resolución de problemas</p>
---	---	---

<p>información (journal revistas científicas, bases de datos, índices, etc.) de calidad (CG2).</p> <p>Muestra un desempeño abierto, sencillo, tolerante, congruente y objetivo al comunicar el saber científico (CG3).</p>		<p>clásicos del tema y su aplicación.</p>
--	--	---

FUENTES DE INFORMACIÓN (Bibliografía, direcciones electrónicas)	EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES (Criterios e instrumentos)
<p>Ira N. Levine <i>Quantum Chemistry</i>. Boston-Pearson, 7th Edition (2014).</p> <p>McQuarrie (2008). <i>Quantum Chemistry</i>. University Science Books</p> <p>Bertran J., Branchadell V., Moreno M. and Sodupe M. <i>Química Cuántica. Fundamentos y Aplicaciones Computacionales</i>. Ed. Síntesis. (2002).</p> <p>Foresman James B., Frisch AEleen. <i>Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods</i>. Segunda Edición. Gaussian Inc. Pittsburg PA (1996).</p> <p>Francisco Dominguez-Adame <i>Física del Estado Sólido: Teoría y Métodos Numéricos</i>, Ediciones Paraninfo. (2001).</p>	<p>Evaluación diagnóstica. Examen del conocimiento previo sin valor en la ponderación final</p> <p>Evaluación de reportes. 10% Instrumentos: Rúbrica Criterios:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Redacción y ortografía. • Organización del contenido. • Correcta aplicación de la redacción científica. • Interpretación de resultados basada en conceptos y experimentos. <p>Evaluación periódica de cuestionarios y conjuntos de problemas. 10% Instrumentos: Cuestionarios y conjuntos de ejercicios. Criterios:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Todas las preguntas y ejercicios están resueltos. • Los ejercicios planteados se revisan y corrigen. <p>Evaluación de presentación electrónica y exposición. 40% Instrumentos: Rúbrica Criterios:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Redacción y ortografía. • Argumentos precisos, relevantes y apoyados en hechos. • Organización del contenido. • Diagramas e ilustraciones. • Correcto uso del lenguaje científico en la exposición de ideas.

	<p>Exámenes Parciales. 40%</p> <p>Instrumentos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Problemas de opción múltiple • Solución de ejercicios • Preguntas conceptuales de verdadero falso <p>Criterios:</p> <p>Los ejercicios tienen un desarrollo matemático y/o conceptual adecuado.</p>
--	---

Cronograma del avance programático

Objetos de aprendizaje	Semanas															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Postulados de la Mecánica Cuántica	x	x	x	x												
Movimiento traslacional: la partícula en una caja					x	x	x	x								
Movimiento vibracional: el oscilador armónico.									x	x	x					
Movimiento rotacional												x	x			
Átomos hidrogenoides.														x	x	x