



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PROGRAMA DE  
MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUÍMICAS  
MAESTRÍA EN CIENCIAS QUÍMICAS  
Programa de actividad académica



Denominación: Principios de estructura de la materia

Clave: 70186	Semestre: 1 - 4	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 3	
Carácter: Obligatoria de elección		Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Teórico	Teoría:	Práctica:	3	24
	3	0		
Modalidad: CURSO		Duración del programa: 8 semanas		

Seriación: No (x) Si ( ) Obligatoria ( ) Indicativa ( )

Actividad académica antecedente: Ninguna

Actividad académica subsecuente: Ninguna

**Objetivo general:**

Presentar los fundamentos de la mecánica cuántica como base para la descripción espectroscópica de sistemas moleculares.

**Objetivos específicos:**

Resolver planteamientos relacionados con el análisis de la solución de la ecuación de Schödinger de un sistema molecular involucrando sus tres grados de libertad: electrónicos, vibracionales y rotacionales.

**Índice temático**

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Antecedentes	3	0
2	Ecuación de onda	3	0
3	Fundamentos matemáticos	3	0
4	Postulados de la mecánica cuántica	3	0
5	Solución de la Ecuación de Schödinger para moléculas	3	0
6	Grados de libertad electrónicos	3	0
7	Vibraciones	3	0
8	Rotaciones	3	0
<b>Total de horas teóricas:</b>		<b>24</b>	
<b>Total de horas prácticas:</b>		<b>0</b>	
<b>Suma total de horas:</b>		<b>24</b>	

**Contenido Temático**

Unidad	Tema y subtemas
1	<b>Antecedentes</b> 1.1. Ondas 1.2. Radiación del cuerpo negro 1.3. Efecto fotoeléctrico 1.4. Efecto Compton 1.5. Cuantización del momento angular 1.6. Evidencia de niveles de energía discretos

	<p>1.7. Naturaleza ondulatoria de las partículas</p> <p>1.8. Difracción de electrones</p> <p>1.9. Experimento de las dos rendijas en electrones</p>
2	<p><b>Ecuación de onda</b></p> <p>2.1. Ecuación de onda</p> <p>2.2. Solución de la ecuación de onda de la cuerda.</p> <p>2.3. Ecuación de Schrödinger</p> <p>2.4. Regla general para establecer la ecuación de Schrödinger</p> <p>2.5. Estados estacionarios</p> <p>2.6. Partícula en una caja</p> <p>2.7. Evolución temporal de un paquete</p> <p>2.8. Relaciones de incertidumbre</p>
3	<p><b>Fundamentos matemáticos</b></p> <p>3.1. Espacio de funciones de una partícula</p> <p>3.2. Notación de Dirac</p> <p>3.3. Representaciones en el espacio de estados</p> <p>3.4. Representaciones en las bases coordenadas y momentos</p>
4	<p><b>Postulados de la mecánica cuántica</b></p> <p>4.1. Postulados.</p> <p>4.2. Interpretación física de los postulados</p> <p>4.3. Compatibilidad de observables</p> <p>4.4. Propiedades generales de la ecuación de Schrödinger</p>
5	<p><b>Solución de la Ecuación de Schrödinger para moléculas</b></p> <p>5.1. Hamiltoniano molecular</p> <p>5.2. Aproximación de Born-Oppenheimer</p> <p>5.3. Aproximación de rotor rígido</p> <p>5.4. Aproximación armónica</p> <p>5.5. Forma general de las líneas de un espectro: posiciones, intensidades y forma</p>
6	<p><b>Grados de libertad electrónicos</b></p> <p>6.1. Funciones propias electrónicas simples</p> <p>6.2. Molécula de hidrógeno</p> <p>6.3. Orbitales moleculares</p> <p>6.4. Método Heitler-London</p> <p>6.5. Aproximación de Hartree-Fock</p>
7	<p><b>Vibraciones</b></p> <p>7.1. Hamiltoniano vibracional</p> <p>7.2. Oscilador armónico unidimensional</p> <p>7.3. Funciones de onda vibracionales</p> <p>7.4. Anarmonicidad. Resonancias</p>
8	<p><b>Rotaciones</b></p> <p>8.1. Ángulos de Euler</p> <p>8.2. Momentos de inercia principales</p> <p>8.3. Hamiltoniano de un rotor rígido</p> <p>8.4. Trompos esféricos</p> <p>8.5. Trompos simétricos</p> <p>8.6. Trompos asimétricos</p> <p>8.7. Moléculas lineales</p>

**Bibliografía básica actualizada:**

1. Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. and Laloe, F. *Quantum Mechanics*, Wiley, New York, 1977.
2. Tinkham, Michael. *Group Theory and Quantum Mechanics*, Dover Publications, Inc. Mineola, New York, 2003.
3. Bunker, Philip R., Jensen, Per. *Fundamentals of Molecular Symmetry*, Institute of Physics, Series in Chemical Physics, IOP Publishing Ltd, Bristol, 2005.
4. Levin, F.S. *An Introduction to Quantum Theory*, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
5. Requena, Alberto y Zúñiga, José. *Espectroscopía*, Pearson Educación, Madrid, España, 2004.

**Bibliografía complementaria:**

1. Drago, Russell S. *Physical Methods in Chemistry*. W.B., Saunders Company, Philadelphia, 1977.
2. Atkins, P.W. and Friedman, R.S. *Molecular Quantum Mechanics*, 3a. edición, Oxford University Press, Oxford, 1997.
3. Harris, Daniel C. and Bertolucci, Michael D. *Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*, Dover Publications, Inc., New York, 1989.

**Sugerencias didácticas:**

Exposición oral	( )
Exposición audiovisual	( )
Ejercicios dentro de clase	( x )
Ejercicios fuera del aula	( x )
Seminarios	( )
Lecturas obligatorias	( )
Trabajo de investigación	( )
Prácticas de taller o laboratorio	( )
Prácticas de campo	( )
Otras: _____	( )

**Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:**

Exámenes parciales	( x )
Examen final escrito	( )
Trabajos y tareas fuera del aula	( x )
Exposición de seminarios por los alumnos	( )
Participación en clase	( )
Asistencia	( )
Seminario	( )
Otras:	( )

**Línea de investigación:**

**Perfil profesiográfico: Maestro en Ciencias, contar con experiencia en el campo de conocimiento de la química y experiencia docente.**