



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



Denominación: Química cuántica I

Clave: 70187	Semestre: 1 – 4	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6	
Carácter: Obligatoria de elección		Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Teórico		Teoría:	3	48
		Práctica:		
Modalidad: CURSO		Duración del programa: Un semestre		

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

Actividad académica antecedente: Ninguna

Actividad académica subsecuente: Ninguna

**Objetivo general:**

Explicar los fundamentos de los métodos *ab initio* de estructura electrónica de átomos y moléculas.

**Objetivos específicos:**

Describir las propiedades de las funciones de onda polieletrónicas.

Aplicar los métodos de Hartree-Fock, interacción de configuraciones, teoría de perturbaciones de Møller-Plesset y teorías de cúmulos acoplados.

**Índice temático**

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Álgebra de operadores	6	0
2	Funciones de onda polieletrónicas	9	0
3	Aproximación de Hartree-Fock	9	0
4	Método de interacción de configuraciones	8	0
5	Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos	8	0
6	Teorías de pares electrónicos	8	0
<b>Total de horas teóricas:</b>		<b>48</b>	
<b>Total de horas prácticas:</b>		<b>0</b>	
<b>Suma total de horas:</b>		<b>48</b>	

**Contenido Temático**

Unidad	Tema y subtemas
1	<b>Álgebra de operadores</b> 1.1. Álgebra lineal 1.2. Ecuación de valores propios 1.3. Operadores 1.4. Método variacional
2	<b>Funciones de onda polieletrónicas</b> 2.1. Aproximación de Born-Oppenheimer 2.2. Superficies de energía potencial 2.3. Principio de exclusión

	2.4. Determinantes de Slater 2.5. Reglas de Condon-Slater 2.6. Configuraciones adaptadas por espín
3	<b>Aproximación de Hartree-Fock</b> 3.1. Obtención de las ecuaciones canónicas de Hartree-Fock 3.2. Operadores de intercambio y de Coulomb 3.3. Teorema de Koopmans 3.4. Teorema de Brillouin 3.5. Ecuaciones de Roothaan 3.6. Método de Hartree-Fock no restringido 3.7. Ecuaciones de Pople-Nesbet 3.8. Procedimiento autoconsistente 3.9. Funciones base poliatómicas
4.	<b>Método de interacción de configuraciones</b> 1.1. Funciones de onda multiconfiguracionales 1.2. Correlación electrónica 1.3. CI doblemente excitado 1.4. CI truncado 1.5. El problema de consistencia en tamaño 1.6. Matrices de densidad reducida de primero orden y orbitales naturales
5	<b>Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos</b> 1.1. Teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger 1.2. Teoría de perturbaciones de Møller-Plesset 1.3. Representación diagramática
6	<b>Teorías de pares electrónicos</b> 6.1. Aproximación de pares electrónicos independientes 6.2. Teoría de pares acoplados

**Bibliografía básica actualizada:**

1. Szabo, Attila and Ostlund, Neil S. *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover Publications, Mineola, New York, 1996.

**Bibliografía complementaria:**

1. McWeeny, R. *Methods of Molecular Quantum Mechanics*, 2nd edition, Academic Press, London, 2001.
2. Helgaker, Trygve, Jorgensen, Poul and Olsen, Jeppe. *Molecular Electronic Structure Theory*, John Wiley & Sons, Chichester, 2000.
3. Levine, Ira N. *Quantum Chemistry*, 6th edition, Prentice Hall, New Jersey, 2009.

**Sugerencias didácticas:**

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

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

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