



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 |
| Total de horas teóricas: | | 24 | |
| Total de horas prácticas: | | 0 | |
| Suma total de horas: | | 24 | |

Contenido Temático

| Unidad | Tema y subtemas |
|--------|---|
| 1 | Antecedentes 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 1.8. Difracción de electrones 1.9. Experimento de las dos rendijas en electrones</p> |
| 2 | <p>Ecuación de onda 2.1. Ecuación de onda 2.2. Solución de la ecuación de onda de la cuerda. 2.3. Ecuación de Schrödinger 2.4. Regla general para establecer la ecuación de Schrödinger 2.5. Estados estacionarios 2.6. Partícula en una caja 2.7. Evolución temporal de un paquete 2.8. Relaciones de incertidumbre</p> |
| 3 | <p>Fundamentos matemáticos 3.1. Espacio de funciones de una partícula 3.2. Notación de Dirac 3.3. Representaciones en el espacio de estados 3.4. Representaciones en las bases coordenadas y momentos</p> |
| 4 | <p>Postulados de la mecánica cuántica 4.1. Postulados. 4.2. Interpretación física de los postulados 4.3. Compatibilidad de observables 4.4. Propiedades generales de la ecuación de Schrödinger</p> |
| 5 | <p>Solución de la Ecuación de Schrödinger para moléculas 5.1. Hamiltoniano molecular 5.2. Aproximación de Born-Oppenheimer 5.3. Aproximación de rotor rígido 5.4. Aproximación armónica 5.5. Forma general de las líneas de un espectro: posiciones, intensidades y forma</p> |
| 6 | <p>Grados de libertad electrónicos 6.1. Funciones propias electrónicas simples 6.2. Molécula de hidrógeno 6.3. Orbitales moleculares 6.4. Método Heitler-London 6.5. Aproximación de Hartree-Fock</p> |
| 7 | <p>Vibraciones 7.1. Hamiltoniano vibracional 7.2. Oscilador armónico unidimensional 7.3. Funciones de onda vibracionales 7.4. Anarmonicidad. Resonancias</p> |
| 8 | <p>Rotaciones 8.1. Ángulos de Euler 8.2. Momentos de inercia principales 8.3. Hamiltoniano de un rotor rígido 8.4. Trompos esféricos 8.5. Trompos simétricos 8.6. Trompos asimétricos 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.