



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Química Cuántica				
Clave: No llenar este campo	Semestre:	Campo de conocimiento: Química		No. Créditos:
Carácter: Optativa de elección		Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Teórico		Teoría: X	Práctica: X	3
Modalidad: CURSO		Duración del programa: 16 semanas		

Actividad académica con seriación antecedente:
Objetivo general: El alumno revisará los conceptos básicos introductorios de la química cuántica. Así como el método de aproximación de referencia simple, es decir, empleando métodos basados en un determinante de Slater y la combinación lineal de orbitales atómicos, para resolver el problema de interacción de electrones.
Objetivos específicos: Comprender los métodos de aproximación de partícula independiente sujeta a un potencial de interacción efectivo y la solución del problema de potencial auto convergente. Modelado de sistemas sencillos con códigos de estructura electrónica.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Fundamentos de la mecánica cuántica. Presentación de los postulados y problemas sencillos	6	
2	Átomo de Hidrógeno, Solución de la ecuación de Schrödinger, Orbitales	6	
3	Métodos Variacionales	6	
4	Métodos Perturbativos	6	
5	Combinación lineal de orbitales gaussianos y la aproximación de Hartree-Fock	6	
6	Introducción a programación en Python y empleo del paquete computacional PSI4numpy	12	12
Total de horas teóricas:		36	
Total de horas prácticas:		12	
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada:
Pilar F.L, Elementary Quantum Chemistry, Seco nd Edition Dover Publications, 2011
Atkins, P. W.; Friedman, R. S., Molecular Quantum Mechanics, 5a. E d, Oxford University press, 2010

Szabo, A.; Ostlund, N.S., Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover Books, 1996

Parr, R.G.; Yang, W., Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University press, 1989

Sugerencias didácticas:

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

Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:

Exámenes parciales	(X)
Examen final escrito	(X)
Trabajos y tareas fuera del aula	()
Exposición de seminarios por los alumnos	()
Participación en clase	()
Asistencia	()
Seminario	()
Otras:	(X)
Empleo de la paquetería Psi4numpy para reforzar aprendizaje, implementación la solución auto consistente de Hartree-Fock y aplicación de la Química Computacional al estudio de problemas modelo	