



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



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: **Química Cuántica II**

Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6	
Carácter: Optativa de elección		Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Curso		Teoría:	3	48
		Práctica:		
Modalidad: Teórica		Duración del programa: 16 semanas		

Actividad académica con seriación antecedente: No aplica
Objetivo general: Adquirir conocimientos fundamentales acerca de métodos correlacionados de función de onda basados en expansiones lineales, teoría de perturbaciones y cúmulos acoplados.
Objetivos específicos: Entender distintas técnicas de métodos de aproximación de funciones de onda correlacionadas

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	1 Segunda cuantización. 1.1 Espacio de Fock. 1.2 Operadores de creación y de aniquilación. 1.3 Representación de operadores monoeléctrónicos y bielectrónicos. 1.4 Matrices de densidad.	6	
2	Espín en segunda cuantización. 2.1 Representación de operadores en bases de orbitales espaciales. 2.2 Operadores tensoriales de espín. 2.3 Funciones de configuración de estado.	6	
3	3 Rotaciones orbitales. 3.1 Transformaciones unitarias como exponenciales de transformaciones antihermitianas. 3.2 Transformaciones unitarias restringidas por simetría	6	
4	Condiciones y teoremas cumplidos por funciones de onda exactas. 4.1 Principio variacional. 4.2 Teorema de Hellmann-Feynman. 4.3 Extensividad en tamaño.	6	
5	Interacción de configuraciones 5.1 Modelo de interacción de configuraciones. 5.2 Extensividad en tamaño. 5.3 Teoría de campo autoconsistente multiconfiguracional.	8	
6	Teoría de cúmulos acoplados. 6.1 Modelo de cúmulos acoplados y el ansatz exponencial. 6.2 Energía y ecuaciones de amplitudes de cúmulos acoplados. 6.3 Ecuación de movimiento de cúmulos acoplados	8	
7	Teoría de perturbaciones de Møller-Plesset. 7.1 Teoría de perturbaciones de Ralley-Schrödinger. 7.2 Teoría de perturbaciones de Møller-Plesset. 7.3 Tratamientos perturbativos de funciones de onda de cúmulos acoplados.	8	
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:			
Suma total de horas:		48	

<b>Bibliografía básica actualizada:</b>	
1 T. Helgaker, P. Jørgensen, J. Olsen Molecular Electronic-Structure Theory Wiley, 2000.	
2 A. S. Szabo, N. S. Ostlund Modern Quantum Chemistry, Dover, 1996.	
3 R. McWeeny Methods of Molecular Quantum Mechanics, Academic Press, 1992	
<b>Bibliografía complementaria:</b>	
<b>Sugerencias didácticas:</b>	<b>Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:</b>
Exposición oral ( X)	Exámenes parciales ( X)
Exposición audiovisual ( )	Examen final escrito ( X)
Ejercicios dentro de clase ( X)	Trabajos y tareas fuera del aula ( X)
Ejercicios fuera del aula ( X)	Exposición de seminarios por los alumnos ( )
Seminarios ( )	Participación en clase ( )
Lecturas obligatorias ( )	Asistencia ( )
Trabajo de investigación ( )	Seminario ( )
Prácticas de taller o laboratorio ( )	Otras: ( )
Prácticas de campo ( )	
Otras: _____ ( )	