



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 monoeléctronicos y bielectronicos. 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 Rayley-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	

Bibliografía básica actualizada:	
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	
Bibliografía complementaria:	
Sugerencias didácticas:	Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:
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: _____ ()	