



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 polielectrónicas.

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 polielectrónicas | 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 |
| Total de horas teóricas: | | 48 | |
| Total de horas prácticas: | | 0 | |
| Suma total de horas: | | 48 | |

Contenido Temático

| Unidad | Tema y subtemas |
|--------|--|
| 1 | Álgebra de operadores 1.1. Álgebra lineal 1.2. Ecuación de valores propios 1.3. Operadores 1.4. Método variacional |
| 2 | Funciones de onda polielectrónicas 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 | Aproximación de Hartree-Fock 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. | Método de interacción de configuraciones 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 | Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos 1.1. Teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger 1.2. Teoría de perturbaciones de Møller-Plesset 1.3. Representación diagramática |
| 6 | Teorías de pares electrónicos 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: | () |