



<p>UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p>  <p>UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p> <p>FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS</p>  <p>PROGRAMA DEL CURSO: QUÍMICA CUÁNTICA</p>	DES:	Ingeniería y Ciencias
	Programa(s) académico(s)	Lic. Químico
	Tipo de Materia: <i>Obligatoria / Optativa</i>	Obligatoria
	Clave de la Materia:	QUP512
	Semestre:	sexto
	Área en plan de estudios (B,P,E,O):	Profesional
	Total de horas por semana:	5
	h./semana trabajo presencial/virtual	4
	h./semana laboratorio/taller	0
	h. trabajo extra-clase:	1
	Total de horas por semestre: <i>Total de horas semana por 16 semanas</i>	80
	Créditos totales:	5
	Fecha de actualización:	26 de Febrero 2024
Responsable(s) del diseño del programa del curso:	Dra. María Elena Fuentes Montero	
Prerrequisito (s):	DIP414	

DESCRIPCIÓN DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/ CURSO:

Integra eficazmente el lenguaje básico y los recursos matemáticos de la Química Cuántica en aplicaciones a escala nanométrica en el contexto profesional de la Química. Adquiere las bases teóricas para después modelar sistemas reales que sean de interés en su desarrollo profesional. Particularmente, adquiere el conocimiento fundamental necesario de la química, y resuelve problemas, para desarrollar proyectos de investigación teóricos y aplicados. Es la asignatura que da el sustento teórico y los postulados en que se basa la asignatura de Química Computacional. Se resalta el papel histórico de la Química Cuántica para el salto que tuvo la Química como ciencia exacta en el siglo XX.

COMPETENCIA PRINCIPAL QUE SE DESARROLLA:

Competencias Básicas:

B1. EXCELENCIA Y DESARROLLO HUMANO

La excelencia educativa promueve el desarrollo humano integral con resultados tangibles obtenidos en la formación de profesionales con conciencia ética y solidaria, pensamiento crítico y creativo, así como una capacidad innovadora, productiva y emprendedora.

Se puntualiza en los aprendizajes, como referente para construir nuevas propuestas y soluciones en el marco de la innovación y pertinencia social, con matices éticos y de valores, que desde su particularidad cultural le permitan respetar la diversidad, promover la inclusión, valorar la interculturalidad.

OTRAS COMPETENCIAS A LAS QUE SE CONTRIBUYE CON EL DESARROLLO DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/CURSO:

DB1. CIENCIAS QUÍMICAS

Resuelve problemas básicos, teóricos y experimentales de las ciencias químicas fundamentales para la interpretación de la naturaleza química de la materia, con un enfoque socialmente responsable.

DB3. HERRAMIENTAS MATEMÁTICAS

Resuelve problemas tanto abstractos como aplicados en las áreas de las ciencias químicas e ingenierías, aplicando las herramientas, el lenguaje o los métodos del modelado matemático.

DB2. FUNDAMENTOS DE ANÁLISIS FÍSICOS

Analiza los fenómenos físicos relacionados a las áreas de ciencias químicas e ingenierías.

DOMINIOS (Se toman de las competencias)	OBJETOS DE ESTUDIO (Contenidos necesarios para desarrollar cada uno de los dominios, temas y subtemas)	RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Se plantean de los dominios y contenidos)	METODOLOGÍA (Estrategias, secuencias, recursos didácticos)	EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO (Productos tangibles que permiten valorar los resultados de aprendizaje)
<p>Dominio de competencias básicas</p> <p>B 1.1 Desarrolla el pensamiento crítico a partir de la libertad, el análisis, la reflexión y la argumentación.</p> <p>Dominio de competencia disciplinar profesional específica básica, y/</p> <p>DB2.5 Aplica los conceptos de onda, partícula y dualidad onda-partícula en el estudio de fenómenos ópticos y ondulatorios en las ciencias</p>	<p>Objeto de estudio 1</p> <p>Postulados de la Mecánica Cuántica</p> <ul style="list-style-type: none"> - Primer postulado: estado de un sistema cuántico. Función de onda: significado físico. Normalización y ortogonalidad. - Segundo postulado: operador asociado a toda variable observable. Álgebra de operadores. Operador energía: hamiltoniano. - Tercer postulado: ecuación de valores propios. Función propia y valor propio de un operador. Operadores hermíticos. 	<p>Domina los conceptos básicos de la mecánica cuántica y la necesidad de esta para la descripción de fenómenos que la teoría clásica falla en describir.</p> <p>Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos</p>	<p>Clase magistral del profesor. A continuación, desarrollo por el alumno de cartografías conceptuales.</p> <p>Resolución periódica de cuestionarios y conjuntos de problemas. Instrumentos: Cuestionarios y conjuntos de ejercicios.</p> <p>Criterios:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Todas las preguntas y ejercicios están resueltos. • Los ejercicios planteados se revisan y corrigen. 	<p>Evaluación escrita, oral o práctica.</p> <p>30%</p>

<p>químicas e ingenierías.</p> <p>Dominio de competencia profesional específica y/o</p> <p>P1.1 Utiliza conceptos, métodos y leyes fundamentales de las ciencias básicas para dar soluciones a problemas complejos de ciencias e ingeniería analizando los resultados para emitir conclusiones acordes a la realidad.</p>	<p>- Cuarto postulado: valor medio de una propiedad (valor esperado).</p>			
<p>Dominio de competencias básicas</p> <p>B 1.1 Desarrolla el pensamiento crítico a partir de la libertad, el análisis, la reflexión y la argumentación.</p> <p>Dominio de competencia disciplinar profesional específica básica, y/</p> <p>DB2.5 Aplica los conceptos de onda, partícula y dualidad onda-partícula en el estudio de fenómenos ópticos y ondulatorios en</p>	<p>Objeto de estudio 2</p> <p>2. Movimiento traslacional: la partícula en una caja</p> <ul style="list-style-type: none"> - La partícula en una caja monodimensional: Funciones de onda y niveles de energía. -Principio de Incertidumbre. Operador conmutador. - Efecto túnel - Separación de variables en sistemas estacionarios 	<p>Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia.</p> <p>Construye el Hamiltoniano y escribe la ecuación de Schrödinger de sistemas polielectrónicos.</p>	<p>Clase magistral del profesor. A continuación, desarrollo por el alumno de cartografías conceptuales.</p> <p>Resolución periódica de cuestionarios y conjuntos de problemas.</p> <p>Instrumentos: Cuestionarios y conjuntos de ejercicios.</p> <p>Criterios:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Todas las preguntas y ejercicios están resueltos. • Los ejercicios planteados se revisan y corrigen. 	<p>Evaluación escrita, oral o práctica.</p> <p>30%</p>

<p>las ciencias químicas e ingenierías.</p> <p>Dominio de competencia profesional específica y/o</p> <p>P1.1 Utiliza conceptos, métodos y leyes fundamentales de las ciencias básicas para dar soluciones a problemas complejos de ciencias e ingeniería analizando los resultados para emitir conclusiones acordes a la realidad.</p>				
<p>Dominio de competencias básicas</p> <p>B 1.2 Propone la solución de problemas con una base interdisciplinar (científica, humanística y tecnológica). Desarrolla de habilidades y capacidades innovadoras, productivas y de emprendimiento..</p> <p>Dominio de competencia disciplinar profesional específica y/o</p> <p>DB2.5 Aplica los conceptos de</p>	<p>Objeto de estudio 3</p> <p>Movimiento rotacional</p> <ul style="list-style-type: none"> - Tratamiento cuántico. - Cuantización del momento angular. - Coordenadas esféricas. - Función de onda del átomo de Hidrógeno: Polinomios de Legendre. Armónicos esféricos. - Niveles energéticos 	<p>Usa técnicas del método de Aprendizaje basado en problemas.</p> <p>Trabaja en equipo para la elaboración de resúmenes y exposiciones.</p> <p>Trabaja en equipo para la integración del contenido de la asignatura en un material educativo.</p>	<p>Utiliza los fundamentos y métodos de la química teórica para explicar y fenómenos fisicoquímicos.</p> <p>Difunde con responsabilidad ética y social el conocimiento científico, tecnológico, artístico y/o humanístico que produce de forma objetiva.</p> <p>Dispositivo de aprendizaje</p>	<p>Presentación electrónica y exposición de un tema que muestre como el modelo teórico es aplicable a la descripción de sistemas con aplicación tecnológica (espectroscopías, transistores, química computacional, celdas solares, etc.) (30%)</p> <p>"Dispositivo de Aprendizaje" o Podcast y exposición evaluados en base a rúbrica y corregidos que demostrarán que el alumno es capaz de hacer uso de</p>

<p>onda, partícula y dualidad onda-partícula en el estudio de fenómenos ópticos y ondulatorios en las ciencias químicas e ingenierías.</p> <p>Dominio de competencia profesional y/o específica</p> <p>P1.1 Utiliza conceptos, métodos y leyes fundamentales de las ciencias básicas para dar soluciones a problemas complejos de ciencias e ingeniería analizando los resultados para emitir conclusiones acordes a la realidad.</p>				<p>los conceptos básicos de la química cuántica para la resolución de problemas clásicos de un tema y su aplicación. (10%)</p>
---	--	--	--	--

FUENTES DE INFORMACIÓN (Bibliografía, direcciones electrónicas)	EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES (Criterios, ponderación e instrumentos)
<p>Bertran J., Branchadell V., Moreno M. and Sodupe M. <i>Química Cuántica. Fundamentos y Aplicaciones Computacionales</i>. Ed. Síntesis. (2002).</p> <p>Bailey L., Troitiño M., <i>Química Cuántica. La Química cuántica en 100 problemas</i>. Ed. Uned (2015).</p> <p>Ira N. Levine <i>Quantum Chemistry</i>. Boston-Pearson, 7th Edition (2014).</p> <p>McQuarrie (2008). <i>Quantum Chemistry</i>. University Science Books</p> <p>Foresman James B., Frisch Aileen. <i>Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods</i>. Segunda Edición. Gaussian Inc. Pittsburg PA</p>	<p>Evaluación diagnóstica.</p> <p>Entrevista de conocimientos previos sin valor en la ponderación final</p> <p>Exámenes Parciales. 30% c/u</p> <p>Instrumentos:</p> <ul style="list-style-type: none"> ● Problemas de opción múltiple ● Solución de ejercicios ● Preguntas conceptuales de verdadero falso ● Exposiciones <p>Criterios:</p> <p>Los ejercicios tienen un desarrollo matemático y/o conceptual adecuado.</p>

	<p align="center">Evaluación de podcast y/o exposición de proyecto (dispositivo). 10%</p> <p>Instrumentos: Rúbrica</p> <p>Criterios:</p> <ul style="list-style-type: none"> ● Redacción y/o ortografía. ● Argumentos precisos, relevantes y apoyados en hechos. ● Organización del contenido. ● Diagramas e ilustraciones. ● Correcto uso del lenguaje científico en la exposición de ideas.
--	--

CRONOGRAMA DEL AVANCE PROGRAMÁTICO

Objetos de Estudio	Semanas															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
OBJETO DE ESTUDIO 1 Postulados de la Mecánica Cuántica	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X						
OBJETO DE ESTUDIO 2 Movimiento traslacional: la partícula en una caja											X	X	X			
OBJETO DE ESTUDIO 3 Movimiento rotacional														X	X	X