


<p style="text-align: center;">UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p>  <p style="text-align: center;">UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p> <p style="text-align: center;">UNIDAD ACADÉMICA: Facultad de Ciencias Químicas</p> <p style="text-align: center;">PROGRAMA DEL CURSO: Química cuántica</p>	DES:	INGENIERÍA Y CIENCIAS
	Programa(s) académico(s)	Químico
	Tipo de Materia: <i>Obligatoria / Optativa</i>	Obligatoria
	Clave de la Materia:	PQ605
	Semestre:	6
	Área en plan de estudios (B,P,E, O):	P
	Total de horas por semana:	7
	Laboratorio o Taller:	0
	h./semana trabajo presencial/virtual	3
	h./semana laboratorio/taller	0
	h. trabajo extra-clase:	4
	Total de horas por semestre: <i>Total de horas semana por 16 semanas</i>	48
	Créditos totales:	48
	Fecha de actualización:	13 diciembre 2022
Prerrequisito (s):	Principios electroópticos; Ecuaciones diferenciales; Cálculo vectorial	

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

COMPETENCIA PRINCIPAL QUE SE DESARROLLA:

CG2: GESTIÓN DEL CONOCIMIENTO:

Demuestra y conocimientos y habilidades para la búsqueda, análisis crítico, síntesis y procesamiento de información para su transformación en conocimiento con actitud ética

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

Se escribe el nombre y tipo de la competencia (B, P, E u O). Se describe la definición general de la (s) competencia (s) a fortalecer con esta unidad de aprendizaje.

CG3: COMUNICACIÓN CIENTÍFICA.

Difunde con responsabilidad ética y social el conocimiento científico, tecnológico, artístico y/o humanístico que produce de forma objetiva.

CG4: INVESTIGACIÓN:

Desarrolla investigación original, tecnología y/o innovaciones en procesos, servicios o productos que contribuyan a la solución de problemas, mejoren la convivencia, generen oportunidades para el desarrollo sustentable y propicien una mejor calidad de vida.

QUIM4 – QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

Utiliza los fundamentos y métodos de la química teórica para explicar y fenómenos fisicoquímicos.

DOMINIOS (Se toman de las competencias)	OBJETOS DE ESTUDIO (Contenidos, temas y subtemas)	RESULTADOS DE APRENDIZAJE	METODOLOGÍA (Estrategias, secuencias, recursos didácticos)	EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO
<p>Demuestra y conocimientos y habilidades para la búsqueda, análisis crítico, síntesis y procesamiento de información para su transformación en conocimiento con actitud ética</p> <p>Difunde con responsabilidad ética y social el conocimiento científico, tecnológico, artístico y/o humanístico que produce de forma objetiva.</p> <p>Desarrolla investigación original, tecnología y/o innovaciones en procesos, servicios o productos que contribuyan a la solución de problemas, mejoren la</p>	<p>1. 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. - Cuarto postulado: valor medio de una propiedad (valor esperado). <p>2. Movimiento traslacional: la partícula en una caja</p>	<p>1. Identifica y articula sus necesidades de conocimiento a partir de definir problemas de información relevante (CG2).</p> <p>2. Accede a diferentes fuentes de información (journal revistas científicas, bases de datos, índices, etc.) de calidad (CG2).</p> <p>3. Aplica los elementos fundamentales de la redacción científica (CG3).</p> <p>4. Muestra un desempeño abierto, sencillo, tolerante, congruente y objetivo al comunicar el saber científico (CG3).</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>Uso de técnicas del método de</p>	<p>Examen escrito donde demuestre el dominio de 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>Presentación electrónica y exposición de un tema que muestre como el modelo teórico es aplicable a la descripción de sistemas con aplicación tecnológica (puntos cuánticos, transistores de efecto túnel resonante, etc.)</p>

<p>convivencia, generen oportunidades para el desarrollo sustentable y propicien una mejor calidad de vida.</p> <p>Utiliza los fundamentos y métodos de la química teórica para explicar y fenómenos fisicoquímicos.</p>	<ul style="list-style-type: none"> - La partícula en una caja monodimensional: Funciones de onda y niveles de energía. - Efecto túnel - Separación de variables en sistemas estacionarios <p>3. 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>4 Átomos bielectrónicos.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Hamiltoniano y resolución de la ecuación de Schrodinger. - Efecto Zeeman 	<p>5. Muestra habilidad para la observación del fenómeno u objeto de estudio en su campo atencional (CG4).</p> <p>6. Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos (QUIM4).</p> <p>7. Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia (QUIM4).</p> <p>8. Construye el Hamiltoniano y escribe la ecuación de Schrödinger de sistemas polielectrónicos (QUIM4).</p>	<p>Aprendizaje basado en problemas.</p> <p>Trabajo en equipo para la elaboración de resúmenes.</p> <p>Trabajo en equipo para la integración del contenido de la asignatura en un material educativo novedoso.</p> <p>Aprendizaje basado en proyectos.</p>	<p>Reporte oral que muestre el dominio del concepto de cuantización de los niveles energéticos y su aplicación en la descripción de espectros atómicos.</p> <p>Podcast autoevaluados y corregidos que demostrarán que el alumno es capaz de hacer uso de los conceptos básicos de la química cuántica para la resolución de problemas clásicos de un tema y su aplicación.</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 AEleen. <i>Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods</i>. Segunda Edición. Gaussian Inc. Pittsburg PA (1996).</p>	<p>Evaluación diagnóstica.</p> <p>Examen del conocimiento previo 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 <p>Criterios:</p> <p>Los ejercicios tienen un desarrollo matemático y/o conceptual adecuado.</p>

Evaluación de podcast y/o exposición de proyecto. 10%**Instrumentos:** Rúbrica**Criterios:**

- Redacción y 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 aprendizaje	Semanas															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Postulados de la Mecánica Cuántica	x	x	x	x	x	x										
Movimiento traslacional: la partícula en una caja							x	x	x	x						
Movimiento rotacional											x	x	x			
Átomos bieletrónicos.														x	x	x