



Área Académica de: Química

Línea de Investigación: Química-física teórica de soluciones y superficies: Estudio teórico (químico cuántico) y experimental (electroquímico) de los diferentes procesos que ocurren en la interfase electrodo-solución.

Programa Educativo: Licenciatura en Química

Nombre de la Asignatura: Optativa IV (Química computacional)

Tema: En este curso se analizan los conceptos teóricos y matemáticos necesarios para evaluar las propiedades electrónicas de sistemas moleculares sencillos empleando los recursos de la química cuántica computacional. Se analizan casos específicos orientados al conocimiento químico.

Ciclo: Agosto-Diciembre 2011

Profesor(a): Dr. Luis Humberto Mendoza Huizar





Objetivo: Proporcionar al estudiante los conocimientos, habilidades y conceptos fundamentales de química cuántica aplicados al entendimiento de las propiedades electrónicas exhibidas por sistemas atómicos y moleculares.

Temas Unidad 1
Mecánica,
cuántica:
Conceptos,
principios y
aplicaciones

I. Introducción

- I.I. Los microsistemas, características y comportamiento.
- I.II El principio de Incertidumbre de Heisenberg
- I.III Estado cuántico. Principio de superposición de estados.
- I.IV. Elementos del formalismo de la mecánica cuántica
 - I.IV.I Interpretación de la función de onda. Cuantificación
 - I.IV.II Operadores y observables
 - I.IV.III Medición en mecánica cuántica
 - I.V.. Postulados de la mecánica cuántica
 - I.V.IV Ecuación de Schrodinger. Soluciones.
- I.VI Funciones de onda autoconsistentes. El método de Hartree-Fock
- I.VII La estructura molecular
 - I.VII.I La aproximación de Born Oppenheimer
 - I.VII.II Orbitales moleculares . Interpretación
- I.VIII Cálculos teóricos de propiedades moleculares
 - I.VIII.I Método de Huckel
 - I.VIII.II Métodos actuales de calculo.





Objetivo: Proporcionar al estudiante los conocimientos, habilidades y conceptos fundamentales para la obtención de propiedades electrónicas de sistemas moleculares.

**Tema
Unidad 2.
Química
Computacional**

- II.I Introducción
 - II.I.I La química cuántica, sus métodos de cálculo y las computadoras
- II.II Superficie de energía potencial
 - II.II.I Localización de puntos estacionarios
 - II.II.II Mínimos locales
 - II.II.III Estados de transición
- II.III Diferentes procedimientos para el cálculo de propiedades estructurales y electrónicas.
 - II.III.I Métodos de correlación electrónica
 - II.III.II Métodos de interacción de configuraciones
 - II.III.III Métodos multiconfiguracionales y multireferenciales
 - II.III.IV Combinación de métodos, metodologías más comunes.
- II.IV Interpretación de resultados
 - II.IV.I Análisis de la densidad electrónica
 - II.IV.II Los orbitales frontera
 - II.IV.III Los orbitales naturales de enlace
 - II.IV.IV Mecanismos de reacción.



**Tema
Unidad 3.
La química
computacional en
acción.**

Objetivo: Calcular propiedades electrónicas de sistemas modelos utilizando software especializado.

- III.I Problemas que pueden ser abordados por la química computacional.
 - Estudios de superficie de energía potencial.
 - Calculo de propiedades estructurales.
 - Calculo de propiedades moleculares
 - Estudio de reacciones químicas
- III.II Forma de proceder
 - Elección del método de cálculo
 - Elección de la base
 - Otros aspectos a tener en consideración
- III.III Los programas de cálculo molecular más comunes.
 - Hyperchem
 - Gaussian
 - Spartan
 - Mopac
 - Otros.



BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA

Biblioteca central de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo.

P. W Atkins, Fisicoquímica, Ed. Addison-Wesley Iberoamericana.

R. Eisberg y R. Resnick, *Física Cuántica*, Limusa, México, 1994.

M.W. Hannah, *Mecánica Cuántica para químicos*, Fondo Educativo Interamericano, México, 1985.

Ira N. Levine, *Química Cuántica*, 5^a. Edición, 1985.

M. Alonso y E.J. Finn, *Física III: fundamentos Cuánticos y Estadísticos*, Fondo Educativo Interamericano, Bogotá, 1971.

A. Szabo y N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*, 1a. edición Ed. McGraw Hill.

Estructura Electrónica. Cruz-Chamizo-Garriz. Ed. Iberoamericana

