

IDENTIFICACIÓN DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE

Unidad académica: Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas.							
Plan de estudios: Licenciatura en Física y Matemáticas							
Unidad de aprendizaje: Física atómica y molecular				Ciclo de formación: Profesional y Especializado Eje general de formación: Generación y aplicación del conocimiento Semestre: 6° al 9°			
Elaborada por: Dr. Alejandro Ramírez Solís				Fecha de elaboración: Marzo, 2021			
Clave:	Horas teóricas	Horas prácticas:	Horas totales	Créditos:	Tipo de unidad de aprendizaje	Carácter de la unidad de aprendizaje:	Modalidad:
	3	2	5	8	Optativa	Teórica-Práctica	Escolarizada
Programa Educativo en el que se imparte: Licenciatura en Física y Matemáticas del Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas.							

ESTRUCTURA DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE

Presentación: Se trata de una unidad de aprendizaje fundamental en la formación de un físico del siglo XXI ya que toda la materia está hecha de átomos y moléculas. El temario de la unidad de aprendizaje está diseñado para ser autocontenido y se presenta de forma que los conocimientos de la estructura electrónica atómica sientan las bases para la comprensión de la compleja estructura electrónica de las moléculas. Se hace énfasis en la parte metodológica para la resolución de la ecuación de Schrödinger molecular una vez que se aplica la aproximación Born-Oppenheimer, incluyendo el tratamiento de los efectos de correlación electrónica que están ausentes en las teorías de campo medio como Hartree-Fock.
Propósito: Distinga la teoría de los átomos mono-electrónicos, multi-electrónicos, al termino de la unidad de aprendizaje, mediante la aplicación de métodos de estructura electrónica <i>ab-initio</i> y de la Teoría de Funcionales de la Densidad, para realizar cálculos moleculares y encontrar soluciones a fenómenos asociados con la espectroscopía molecular, e identificar los fundamentos de las espectroscopías electrónica (UV-vis, Rayos-X), vibracional (infraroja) y rotacional (microondas), y distingue las reglas de selección que se aplican en cada caso con capacidad de abstracción, análisis y síntesis.
Competencias que contribuyen al perfil de egreso.
Competencias genéricas:
CG2. Capacidad de pensamiento crítico y reflexivo. CG4. Capacidad de abstracción, análisis y síntesis. CG9. Capacidad de comunicación oral y escrita. CG11. Habilidades para buscar, procesar y analizar información. CG16. Capacidad para identificar, plantear y resolver problemas.
Competencias específicas:
CE1. Plantea y analiza problemas físicos, tanto teóricos como experimentales, utilizando métodos analíticos, experimentales o numéricos, para encontrar soluciones e interpretarlas en sus contextos originales con eficiencia, funcionalidad y creatividad.

CE 4. Aplica competencias, conocimientos y habilidades en Física y Matemáticas, mediante la solución innovadora a problemas planteados en el sector público, privado o social, con la finalidad de fortalecer el desarrollo científico y tecnológico del país, con actitudes y valores que les permitan ser agentes de cambio.

CE 5. Posee conocimientos, habilidades, valores y actitudes requeridos en investigación inter y multidisciplinaria de las ciencias básicas y aplicadas, mediante el análisis, intercambio y producción de información entre grupos académicos de diferentes campos disciplinares que involucren a la física y la matemática, para contribuir científicamente en equipos de investigación con un sentido de trabajo colaborativo y profesional.

CE 7. Comunica asertivamente conceptos, objetivos, métodos y resultados del lenguaje científico, mediante la comunicación oral y escrita, para presentar propuestas y proyectos de manera eficaz, funcional y aplicable.

CONTENIDOS

Bloques:	Temas:
I. Átomos monoelectrónicos.	1.1 Conceptos fundamentales, escala, unidades atómicas 1.2 Minimización de la Acción y la constante de estructura fina 1.3 Ecuación de Schrödinger no-relativista para el átomo de hidrógeno 1.4 Solución de las ecuaciones radial y angular para estados ligados 1.5 Degeneraciones (l,m) y cantidades conservadas: el momento angular y el vector de Runge-Lenz 1.6 Explicación de las series de Balmer, Paschen, Bracket y Pfund 1.7 Transiciones radiativas y reglas de selección 1.8 El efecto Zeeman 1.9 Corrimiento Lamb $^2S_{1/2}$ - $^2P_{1/2}$: las fluctuaciones cuánticas del vacío 1.10 Efectos relativistas escalares: corrección de masa-velocidad y de Darwin 1.11 Aproximaciones del Hamiltoniano dependiendo de Z 1.12 Acoplamiento de momentos angulares 1.13 Deducción de los coeficientes de Clebsch-Gordan 1.14 Acoplamiento spin-órbita: esquemas LS y JJ. 1.15 Efectos relativistas espinoriales: Ecuación de Dirac
II. Átomos multielectrónicos.	2.1 Ecuación de Schrödinger para átomos multielectrónicos 2.2 Acoplamiento de momentos angulares orbitales, la notación espectroscópica 2.3 Ansatz y teorías de campo medio. 2.4 Aproximación de Hartree y de Hartree-Fock 2.5 El método Hartree-Fock de Campo Autoconsistente (HF-SCF) 2.6 El operador de Fock para sistemas de capa cerrada y capa abierta. 2.7 Aproximación HF de spin restringido (RHF) y el no-restringido (UHF)

<p>III. Métodos de estructura electrónica ab initio.</p>	<p>3.1 Método de Roothan. Derivación de las ecuaciones LCAO-SCF 3.2 LCAO y bases atómicas para cálculos moleculares 3.3 La correlación electrónica: correlación dinámica vs. correlación estática 3.4 Métodos para tratar la correlación estática: MCSCF y del espacio activo completo-SCF (CASSCF) 3.5 Métodos para tratar la correlación dinámica. 3.6 El problema de la consistencia de talla y los diagramas de Feynman. 3.7 Teoría de perturbaciones Möller-Plesset de orden n: MPn 3.8 Métodos variacionales de interacción de Configuraciones 3.9 DCI, SDCI, SDTQ, IC-completo 3.10 Método de Cúmulos Acoplados (Coupled-Cluster) 3.11 CC truncados: CCD, CCSD, CCSD(T) 3.12 Métodos de IC multi-referenciales: MRCI, MR-MP2, CASPT2</p>
<p>IV. Teoría de Funcionales de la Densidad.</p>	<p>4.1 El teorema de Hohenberg y Kohn 4.2 Las ecuaciones de Kohn-Sham (KS) 4.3 El método KS-SCF 4.4 La funcional de intercambio y correlación (XC) 4.5 Aproximación de la Densidad Local (LDA) 4.6 Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) 4.7 Funcionales meta-GGA 4.8 Funcionales XC híbridos 4.9 Aplicaciones y limitaciones de la DFT actual</p>
<p>V. Estructura molecular.</p>	<p>5.1 Ecuación de Schrödinger para moléculas 5.2 Porqué son mas estables las moléculas que los átomos 5.3 La deslocalización electrónica vs. apareamiento de spin. 5.4 Electrones en edificio multinuclear: Operadores de simetría en moléculas lineales y los casos paradigmáticos: H₂O, NH₃ y CH₄ 5.5 Orbitales híbridos: el caso del carbono y el diamante 5.6 Aproximación Born-Oppenheimer 5.7 La superficie de energía potencial para cada estado electrónico, significado y su determinación. 5.8 Grados de libertad vibracionales y reaccionales 5.9 Orbitales moleculares a partir de orbitales atómicos: Método LCAO-SCF 5.10 El enlace químico y tipos de enlaces: covalente, iónico, metálico, van der Waals, puente de hidrógeno 5.11 Reacciones químicas: formación y disociación molecular 5.12 Cálculo de la entalpía y la entropía. Energía Libre de Helmholtz y de Gibbs 5.13 Energías de activación y estados de transición 5.14 El efecto de la temperatura y velocidades de reacción. 5.15 La Ley de Arrhenius</p>

VI. Espectroscopía Molecular.	6.1 Simetría molecular y reglas de selección 6.2 Grupos puntuales y representaciones irreducibles 6.3 Espectros electrónicos: UV, visible y Rayos-X 6.4 Momentos dipolares de transición. 6.5 Transiciones permitidas o prohibidas por spin: fluorescencia vs. Fosforescencia 6.6 Fuerza de oscilador y probabilidades de transición electrónica. 6.7 Espectros vibracionales. Espectroscopía infrarroja y Raman 6.8 Espectros rotacionales 6.9 Cálculo de espectros vibracionales a partir de primeros principios
-------------------------------	--

ESTRATEGIAS DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE

Estrategias de aprendizaje sugeridas (Marque X)			
Aprendizaje basado en problemas	(x)	Nemotecnia	()
Estudios de caso	(x)	Análisis de textos	(x)
Trabajo colaborativo	(x)	Seminarios	()
Plenaria	()	Debate	()
Ensayo	()	Taller	(x)
Mapas conceptuales	()	Ponencia científica	()
Diseño de proyectos	()	Elaboración de síntesis	(x)
Mapa mental	()	Monografía	()
Práctica reflexiva	()	Reporte de lectura	()
Tripticos	()	Exposición oral	(x)
Otros			
Estrategias de enseñanza sugeridas (Marque X)			
Presentación oral (conferencia o exposición) por parte del profesorado	(x)	Experimentación (prácticas)	()
Debate o Panel	()	Trabajos de investigación documental	(x)
Lectura comentada	(x)	Anteproyectos de investigación	(x)
Seminario de investigación	(x)	Discusión guiada	()
Estudio de Casos	(x)	Organizadores gráficos (Diagramas, etc.)	()
Foro	()	Actividad focal	()
Demostraciones	()	Analogías	()
Ejercicios prácticos (series de problemas)	(x)	Método de proyectos	()
Interacción la realidad (a través de videos, fotografías, dibujos y software especialmente diseñado).	(x)	Actividades generadoras de información previa	()
Organizadores previos	()	Exploración de la web	()
Archivo	()	Portafolio de evidencias	()
Ambiente virtual (foros, chat, correos, ligas a otros sitios web, otros)	()	Enunciado de objetivo o intenciones	()
Otra, especifique (lluvia de ideas, mesa redonda, textos programados, cine, teatro, juego de roles, experiencia estructurada, diario reflexivo, entre otras):			

CRITERIOS DE EVALUACIÓN

Criterios sugeridos	Porcentaje
<ul style="list-style-type: none">Exámenes parciales	30%
<ul style="list-style-type: none">Examen final	40%
<ul style="list-style-type: none">Participación en clase	10%
<ul style="list-style-type: none">Tareas	20%
Nota: Algunos de los instrumentos de evaluación que se pueden considerar son: Rúbricas, escalas de cotejo, escala estimativa, entre otros.	
Total	100 %

PERFIL DEL PROFESORADO

Preferentemente con nivel Doctorado en Física, Matemáticas o área afín a la disciplina de la unidad de aprendizaje, que asegure un dominio integral de los saberes en su campo, es deseable que cuente con experiencia docente y en la generación y aplicación del conocimiento como ejercicio de su profesión.

REFERENCIAS

- Básicas:**
- A. Szabo, N. Ostlund. *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*
- P.W. Atkins. *Molecular Quantum Mechanics*
- D. McQuarrie. *Quantum Chemistry*

Complementarias:

- F.W Pilar. *Elementary Quantum Chemistry*
- R. McWeeny. *Methods of Molecular Quantum Mechanics.*
- D.P. Craig. *Molecular Quantum Electrodynamics*
- F. Cotton. *Group Theory and Molecular Structure*