

DOCTORADO EN INGENIERÍA
UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA
MICROCURRÍCULO

INFORMACIÓN DE LA ASIGNATURA

Programa académico	Doctorado en Ingeniería
Nombre de la asignatura	Química Cuántica
Código de asignatura	DV1F30
Semestre y año en que se imparte la asignatura	Segundo semestre del 2022
Profesor de la asignatura	José Luis Sanz
Afiliación institucional del profesor	NA
Correo electrónico del profesor	jose.sanz@udea.edu.co

DESCRIPCIÓN

1. Descripción y justificación de la asignatura

La asignatura de Química Cuántica proporciona una introducción a métodos computacionales para analizar la estructura electrónica y las propiedades de las moléculas. La teoría se combina con experiencia práctica "práctica" con las aplicaciones de la química cuántica para obtener información sobre orbitales moleculares, geometrías moleculares, estados de transición.

2. Objetivo de la asignatura

Se espera que al finalizar este curso el estudiante este en capacidad de modelar y estimar sistemas químicos cuánticos, realizar cálculos de química cuántica de última generación y podrá usarlos en una serie de situaciones, incluidas aplicaciones en química sintética y predicción precisa de propiedades físicas.

3. Contenido de la asignatura

- Breve revisión de la teoría cuántica y su trasfondo matemático. Ecuación de Schrödinger para un sistema multieletrónico. Aproximación de Born-Oppenheimer. Espín de electrones. La función de onda de muchos electrones más simple: un determinante de Slater.
- Ecuaciones de Hartree-Fock. Orbitales ocupados y virtuales. teorema de Brillouin. Teorema de Koopman. Orbitales moleculares, ecuaciones de Hartree-Fock-Roothaan y el procedimiento de campo autoconsistente. Interpretación de los resultados de los cálculos de Hartree-Fock.
- Tipos y propiedades de conjuntos de bases de orbitales atómicos utilizados para construir orbitales moleculares. Especificación de geometrías moleculares a través de matrices Z.
- Interacción de configuración. Teoría de campo autoconsistente de configuración múltiple (MC SCF), SCF de espacio activo completo (CAS SCF), teoría de perturbaciones de muchos cuerpos (MBPT).
- El teorema de Hohenberg-Kohn. Funcionales de intercambio y funcionales de correlación. Detalles de los cálculos de DFT.

4. Requisitos

Competencias:

- Algebra lineal.
- Ecuaciones diferenciales.
- Fundamentos de Física Clásica.
- Habilidades de programación en Python.

5. Evaluación de la asignatura

Para la obtención de la nota definitiva se realizarán talleres de acuerdo con cada Resultado de Aprendizaje.

6. Recursos

- Libros de texto

- [1] Schartz C. George, Ratner A. Mark, Quantum Mechanics in Chemistry, 2012.
- [2] Szabo Attila, Ostlund Neil, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, 2012.
- [3] Leach Andrew, Molecular Modelling: Principles and Applications 2nd Edición, 2001.

- Herramientas computacionales

- o Python
- o Herramientas ofimáticas

- Recursos en línea

- o Bases de datos suscritas por la Universidad Tecnológica de Pereira